



Institut für Festkörperforschung

***Untersuchungen zum spinabhängigen
ballistischen Transport***

Olaf Wunnicke

***Untersuchungen zum spinabhängigen
ballistischen Transport***

Olaf Wunnicke

Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 4085

ISSN 0944-2952

Institut für Festkörperforschung Juel-4085

D 82 (Diss., Aachen, RWTH, 2003)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

☎ 02461/61-5220 · Telefax: 02461/61-6103 · e-mail: zb-publikation@fz-juelich.de

Kurzfassung

Untersuchungen zum spinabhängigen ballistischen Transport

In dieser Arbeit werden zwei Phänomene des spinabhängigen ballistischen Transports mit Hilfe von *ab initio* Korringa-Kohn-Rostocker Rechnungen und eines analytischen Modells theoretisch untersucht. Der ballistische Leitwert wird in linearer Antwort Theorie (Landauer Formel) in einem Green-Funktions Formalismus berechnet.

Im ersten Teil werden die sogenannten “Hot Spots” untersucht, die in *ab initio* Rechnungen des \mathbf{k}_{\parallel} -aufgelösten Leitwerts von magnetischen Tunnelwiderständen gefunden wurden. Die vollständige Transmission der Elektronen in den Hot Spots wird mit Hilfe eines analytischen Modells als Resonanzeffekt von Grenzflächenzuständen auf beiden Seiten der Barriere erklärt. Mit detaillierten *ab initio* Rechnungen wird gezeigt, dass die Hot Spots den gesamten Leitwert bis zu einer bestimmten Barrierendicke bestimmen können.

Im zweiten Teil wird eine der grundlegenden Erfordernisse für die Spinelektronik untersucht: die Erzeugung eines spinpolarisierten Stromes in einem nichtmagnetischen Halbleiter. Hier wird die ballistische Spininjektion aus dem Ferromagneten Fe in die Halbleiter ZnSe und GaAs berechnet. Es werden unterschiedliche Wachstumsorientierungen sowie Injektionsprozesse betrachtet. Es zeigt sich, dass für (001) orientierte ideale Fe/Halbleiter Heterostrukturen ein nahezu vollständig spinpolarisierter Strom injiziert wird. Die Ursache hierfür sind die unterschiedlichen Symmetrien der Fe Majoritäts- und Minoritätszustände an der Fermienergie.

Abstract

Investigations of the spin-dependent ballistic transport

In this thesis two phenomena of the spin-dependent ballistic transport are investigated theoretically by means of *ab initio* Korringa-Kohn-Rostocker calculations and an analytical model. The ballistic conductance is evaluated in linear response theory (Landauer formula) by a Green-function formalism.

In the first part the hot spots found in *ab initio* calculations of the \mathbf{k}_{\parallel} resolved conductance of tunneling magneto resistance junctions are investigated. Based on an analytical model the full transmission of the electrons in the hot spots is attributed to a resonance effect of interface states on both sides of the barrier. Detailed *ab initio* studies show that the total conductance can be dominated by the hot spots up to a critical barrier thickness.

In the second part one of the fundamental needs for spinelectronics is investigated: the injection of a spin-polarized current into a non-magnetic semiconductor. Here the ballistic spin injection from the ferromagnet Fe into the semiconductors ZnSe and GaAs is calculated for different growth orientations and injection processes. It will be shown that for (001) oriented ideal heterojunctions a nearly 100% spin polarized current is injected into the semiconductor. This can be explained by the symmetry mismatch of the Fe majority and minority states at the Fermi energy.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Dichtefunktionaltheorie	7
2.1	Einleitung	7
2.2	Theorem von Hohenberg und Kohn	9
2.3	Kohn-Sham Gleichung	10
2.4	Spinabhängige Dichtefunktionaltheorie	12
2.5	Lokale Spindichtenäherung	13
2.5.1	Diskussion der Lokalen Spindichtenäherung	13
3	KKR Green-Funktions-Methode	15
3.1	Eigenschaften der Green-Funktion	15
3.2	Bestimmung der Einfach-Streulösungen	18
3.3	Vielfachstreufomalismus	19
3.4	Tight Binding Formalismus	21
3.5	Geometrien	23
3.5.1	Dreidimensionale Bulk Geometrie	23
3.5.2	Zweidimensionale Geometrie	23
4	Ballistischer Leitwert	29
4.1	Einleitung	29
4.2	Landauer-Büttiker Formalismus	31
4.3	Lineare Antwort Theorie des Leitwerts	36
4.4	Implementierung in das KKR Programm	40
4.4.1	Berechnung des Stromdichteoperators	44
4.4.2	Unterschiede zum Baranger-Stone Formalismus	46
5	Hot Spots	49
5.1	Einleitung	49
5.1.1	Tunnelmagnetowiderstand	50
5.1.2	Co/Vakuum/Co(001) TMR Struktur	53
5.1.3	Hot Spots	57
5.2	Analytisches Modell der Hot Spots	58

5.2.1	Beschreibung des Modells	58
5.2.2	Zweidimensionales Modell mit senkrechtem Einfall	64
5.2.3	Dreidimensionales Modell mit beliebigem Einfall	79
5.3	Ab initio Ergebnisse der Hot Spots	82
5.3.1	Struktur der Hot Spots	82
5.3.2	Einfluss auf den integrierten Leitwert	84
5.3.3	Abhängigkeit von der Barrierendicke	88
5.3.4	Aufspaltung der beiden Resonanzen	89
5.4	Zusammenfassung und Diskussion	91
6	Ballistische Spininjektion	95
6.1	Einleitung	95
6.1.1	Experimenteller Nachweis der Spininjektion	98
6.1.2	Ballistische Spininjektion	102
6.1.3	Modellierung und Rechnungsdetails	103
6.2	Fe/Halbleiter(001)	105
6.2.1	Heiße Spininjektion	106
6.2.2	Thermische Spininjektion	120
6.2.3	Spininjektion durch eine Schottkybarriere	124
6.3	Fe/Halbleiter(111)	137
6.4	Fe/Halbleiter(110)	141
6.5	Zusammenfassung und Diskussion	146
7	Zusammenfassung	149
A	Lineare Antwort Theorie des Leitwertes	155
B	Evaneszente Zustände in der Leitwertberechnung	163
C	Mittelwertbildung bei der Leitwertberechnung	167
C.1	Modellkristall mit konstanten Potentialen	167
C.2	Bulk ZnSe(001)	172

Kapitel 1

Einleitung

Die Entwicklung der Computertechnologie (Mikroprozessoren, Speicher etc.) ist aufgrund des riesigen Marktes so rasant wie ansonsten bei fast keiner anderen Technologie. Inzwischen sind die Mikroprozessoren in nahezu jedem Bereich des Lebens zu finden und stellen in den meisten Fällen eine erhebliche Entlastung oder Vereinfachung dar. Dabei wird die Entwicklung von zwei Hauptzielen geleitet: Zum einen sollen die Computer immer leistungsfähiger werden und zum anderen soll der Preis möglichst niedrig sein. Um beides zu erreichen, muss die Größe der Bauelemente ständig weiter verkleinert werden. Somit erhöht sich nicht nur die Geschwindigkeit, sondern es können auch mehr Bauelemente in einem Herstellungsschritt produziert werden, was ein entscheidender Kostenfaktor ist. So verdoppelt sich die Zahl der Transistoren pro Mikroprozessor im Mittel alle 18 Monate. Dies wird durch das Mooresche Gesetz, benannt nach dem Intel Mitbegründer Gordon E. Moore, beschrieben. Gleichzeitig nimmt die Größe der Bauelemente ab. Die kleinste typische Länge im Mikroprozessor liegt zur Zeit bei etwa 90nm. Es wird erwartet, dass diese im Jahre 2016 auf 22nm geschrumpft ist [1]. Diese zukünftige Mikroelektronik wird daher auch Nanoelektronik genannt.

Somit werden in wenigen Jahren Längenskalen erreicht, bei denen die quasiklassische Beschreibung des Stromtransports nicht mehr gültig sein wird. Stattdessen werden quantenmechanische Effekte immer dominanter werden. Die mittlere freie Weglänge wird vergleichbar oder größer werden als die Abmessungen des Bauelements, und somit wird der Stromtransport ballistisch erfolgen, d.h. ohne inelastische oder inkohärente Streuung. Es werden sich quantenmechanische Eigenschaften bemerkbar machen, wie die Quantisierung des Leitwertes, die Ausbildung von Quantentrogzuständen oder Fluktuationen des Leitwertes aufgrund unterschiedlicher Störstellenkonfigurationen. Daher werden die Bauteile mit der momentanen Technologie nicht mehr viel weiter verkleinert werden können. Es muss nach neuen Möglichkeiten im Bereich der Quantenmechanik gesucht werden.

Da die industrielle und besonders die Grundlagenforschung eine mehrjährige Vorlaufzeit hat, bevor die neuen Entwicklungen in der Massenproduktion eingesetzt werden, wird schon bald eine neue Technologie entwickelt werden müssen. Eine besonders vielversprechende Richtung, die diese Erwartungen erfüllt, ist die Magneto- [2] und besonders die Spinelektronik [3–7].

In der Informationstechnologie ist der elektrische Strom so selbstverständlich wie die Informationsspeicherung durch die Magnetisierung von ferromagnetischen Schichten wie beispielsweise in Festplatten. Beide Phänomene, der elektrische Strom und die Magnetisierung, werden von Elektronen hervorgerufen. Das erste von der Ladung $q = -1.6022 \times 10^{-19} C$ und das zweite von dem magnetischen Moment des Elektrons $m_e = -g_e \mu_B S = -9.2848 \times 10^{-24} J/T$, wobei $g_e = 2.0023$ das gyromagnetische Verhältnis, $\mu_B = |q|\hbar/(2m)$ das Bohrsche Magneton und $S = 1/2$ der Spin des Elektrons ist. Die Elektronen wechselwirken sowohl mit einem elektrischen Feld als auch mit einem äußeren magnetischen Feld oder über die Austauschwechselwirkung mit den magnetischen Momenten einer ferromagnetischen Schicht. Daher liegt es nahe, beide Eigenschaften des Elektrons miteinander zu verknüpfen. Dieses ist das Ziel der Magnetoelektronik bzw. der Spinelektronik.

Die Entdeckung des Riesen-Magnetowiderstand (GMR) Effektes 1988 von Fert und Mitarbeitern in Paris [8] und unabhängig davon von Grünberg und Mitarbeitern in Jülich [9] hat die Magnetoelektronik initiiert. Die Idee dabei ist, dass in Anwendungen nicht nur die Ladung des Elektrons, wie in der Mikroelektronik, sondern zusätzlich der Spin benutzt wird. Heutzutage wird der GMR Sensor bereits sehr erfolgreich als Lesekopf in Festplatten eingesetzt. Außerdem wurden bereits erste Prototypen von *Magnetic Random Access Memories* (MRAMs) hergestellt, die die Informationen in magnetischen Schichten speichern und mit Hilfe des GMR Effektes wieder auslesen. Ein großer Vorteil dieser Speicher ist, dass sie schnell und nichtflüchtig sind, also die Informationen ohne Spannungsversorgung behalten.

Eine andere Möglichkeit, die Magnetisierungsrichtung elektronisch wieder auszulesen, besteht über den Tunnelmagnetowiderstand (TMR) Effekt [10]. Dieser hat die Vorteile, dass die relative Widerstandsänderung größer als beim GMR Effekt ist und der Sperrwiderstand in derselben Größenordnung wie in der Halbleiterelektronik liegt. Daher werden diesen Tunnelementen in MRAMs eine große Zukunft zugebilligt, und erste kommerzielle MRAM Produkte für Mobiltelefone und digitale Kameras sind für dieses bzw. nächstes Jahr von Motorola und IBM angekündigt worden.

Das 1990 von Datta und Das [11] vorgeschlagene elektrische Analogon des elektrooptischen Modulators, der Spin-Feld-Effekt-Transistor, wird als Startpunkt der Spinelektronik angesehen. In der Spinelektronik, kurz *Spintronics*, wird die zu verarbeitende Information nicht mehr von der Ladung, sondern von dem Spin getragen. Daher nehmen die Halbleiter eine zentrale Rolle ein, da sie im Gegensatz zu Metallen einen Transport der Spininformation über 100 Mikrometer erlauben [12, 13]. Diese neue Form der Mikroelektronik wird als Hoffnungsträger für eine leistungsfähigere und kleinere Mikroelektronik angesehen.

In der jüngeren Spinelektronik gibt es noch kein in der Massenproduktion eingesetztes Bauelement wie der GMR Lesekopf von Festplatten. Es wird noch teilweise an den grundlegenden Erfordernissen der Spinelektronik geforscht, aber es sind bereits einige sehr vielversprechende Anwendungen vorgeschlagen und teilweise schon realisiert worden. So kann mit einem spinpolarisierten Strom die Magnetisierungsrichtung einer dünnen ferromagnetischen Schicht gedreht werden [6, 14], was als Schreibvorgang in magnetischen Speichern einsetzbar ist. Weiter wurden bereits programmierbare Logik-Bausteine [15] entwickelt,

die während der Programmausführung im Computer umprogrammiert werden können. Zu den grundlegenden Erfordernissen der Spinelektronik zählt die Erzeugung eines spinpolarisierten Stromes, der Transport und die Manipulation des Spins sowie die Detektion der Spininformationen. Während der Transport und die Manipulation schon experimentell realisiert werden konnten, ist die Erzeugung eines für die Anwendung ausreichend spinpolarisierten Stromes noch eine große Herausforderung.

Welche Vorteile haben die Magneto- bzw. die Spinelektronik gegenüber der konventionellen Mikroelektronik, die nur auf die Ladung des Elektrons setzt? Im Folgenden werden einige dieser Vorteile aufgelistet, die erst zum Teil experimentell umgesetzt werden konnten.

- **Flexibilität**

Durch den zweiten Freiheitsgrad wird eine viel größere Freiheit bei der Erfindung neuer Bauteile geschaffen. Die Spinelektronik lässt sich beispielsweise sehr gut mit der Mikro- und der Optoelektronik [16] kombinieren. Allerdings herrscht die Meinung vor, dass das volle Leistungsspektrum der Magneto- und besonders der Spinelektronik noch nicht abgesehen werden kann. So sind Anwendungen denkbar, die kein Pendant in der konventionellen Mikroelektronik haben.

- **Geschwindigkeit**

Um leistungsfähigere Computer und schnellere Bauteile für die Informationsverarbeitung und Kommunikation herstellen zu können, werden immer schnellere Transistoren, Speicher etc. benötigt. Da der Spin des Elektrons sehr schnell manipuliert werden kann, werden der Spinelektronik große Leistungsreserven im Vergleich zur klassischen Mikroelektronik eingeräumt. Außerdem kann die Magnetisierungsrichtung von magnetischen Speicherzellen in weniger als 200ps [17, 18] umgedreht werden, wodurch Schreibgeschwindigkeiten in MRAMs von mehreren GHz erreicht werden können.

- **Nichtflüchtige Speicher**

Die heutzutage in Computern eingesetzten Speicher sind in der Regel flüchtig, d.h. sie verlieren ihre Information, sobald die Versorgungsspannung ausgeschaltet wird oder sind im Vergleich zum Mikroprozessor extrem langsam. Daher sind nichtflüchtige und schnelle Speicher sehr wünschenswert. Inzwischen wurden bereits Prototypen von magnetischen Speicherzellen hergestellt, die die Informationen in der Magnetisierungsrichtung von dünnen ferromagnetischen Schichten speichern, die auch ohne Stromversorgung beibehalten werden, und ein hohes Geschwindigkeitspotential besitzen.

- **Stromverbrauch**

Der Stromverbrauch von neuen Höchstleistungscomputern steigt immens an und ist inzwischen eine große Herausforderung geworden. Auch hier hat die Spinelektronik Vorteile, da nur eine geringe Energie zum Umlappen eines Spins benötigt wird und so die Leistungsaufnahme verringert werden kann. Weiter wird erwartet, dass der Stromverbrauch von MRAMs geringer ist als der von zur Zeit verwendeten Computerspeichern. Bei diesen wird die meiste Leistung zum Auffrischen der Informationen

in den Speicherzellen benötigt. Da dies bei magnetischen Speicherzellen nicht erforderlich ist, kann mit MRAMs der Stromverbrauch drastisch reduziert werden.

- **Skalierbarkeit**

Die Größe der Transistoren und Speicherzellen ist sehr entscheidend für die Geschwindigkeit und die Kosten. Hier wird der Spinelektronik ein großes Potential zum weiteren Verkleinern zugesprochen, da viele Effekte in der Spinelektronik von Grenzflächen, wie z.B. die Spininjektion, hervorgerufen werden. Weiter können magnetische Nanopartikel eine eindomänige Struktur annehmen, dessen Magnetisierungsrichtung sich sehr schnell kohärent drehen lässt. Auch sind die typischen Längen, um den Spin zu manipulieren, mit etwa 1nm eine Größenordnung kleiner als in der herkömmlichen Halbleiterelektronik. Weiter gibt es bei der momentanen Technologie Grenzen. So besteht beispielsweise bei neuen CMOS Transistoren die SiO₂ Gate Isolationsschicht nur noch aus einigen wenigen Monolagen des Isolationsmaterials [19].

- **Industrielle Fertigung**

Ein weiterer großer Vorteil der Spinelektronik gegenüber anderen Formen der Elektronik wie der Molekül-Elektronik, der organischen Elektronik oder der Elektronik mit Kohlenstoff Nanoröhrchen ist, dass die konventionellen Herstellungsprozesse wie die Schichtabscheidung und die Lithographie weiterhin eingesetzt werden können. Somit lässt sich die Magnetoelektronik leicht in bestehende Halbleiterprozesse integrieren und mit konventionellen Mikroelektronikschaltkreisen kombinieren.

Zum Verständnis und zur Optimierung der Bauteile der Nanoelektronik sowie besonders der Magneto- und Spinelektronik wird eine theoretische Methode benötigt, die die Materialeigenschaften auf atomarer Ebene mit einer hohen Genauigkeit quantenmechanisch beschreiben kann. Für die Spinelektronik ist es zudem wichtig, dass die magnetischen Eigenschaften berücksichtigt werden können. Gleichzeitig muss der ballistische Stromtransport auf denselben Grundlagen berechnet werden können. Da das Verhalten im Nanometerbereich vom gesamten Bauelement abhängen wird, muss diese Methode auch in der Lage sein, sehr große Systeme mit mehreren hundert Atomen zu berechnen.

Die Methode der Wahl, die diese Voraussetzungen bereits mit den heutzutage zur Verfügung stehenden Rechenleistungen in sehr guter Weise erfüllt, ist die Dichtefunktionaltheorie. Damit können angefangen von kleinen Clustern bis hin zu großen Systemen mit mehreren hundert Atomen die elektronischen und strukturellen Eigenschaften ohne anzupassende Parameter (*ab initio*) sehr genau bestimmt werden. Andere Methoden sind entweder numerisch so aufwendig, dass sie nur auf kleine Moleküle oder Volumenfestkörper mit wenigen Atomen in der Einheitszelle angewendet werden können, oder beruhen teilweise auf empirischen Parametern, weshalb deren Ergebnisse nur eine geringere Genauigkeit besitzen. Auf der Dichtefunktionaltheorie aufbauend kann ebenfalls der Stromtransport und somit die elektronischen Eigenschaften des Bauelements bestimmt werden. Auf dieser Basis konnte bereits der diffusive Transport in GMR Strukturen, z.B. [20], und auch der ballistische Transport durch TMR Strukturen, z.B. [21], berechnet werden. Damit stellt die Dichtefunktionaltheorie ein wichtiges Mittel nicht nur für die zukünftige Nanoelektronik,

sondern auch für die zu entwickelnde Magneto- und Spinelektronik dar. In dieser Arbeit wird die Dichtefunktionaltheorie angewendet, um zwei Aspekte der Magneto- bzw. der Spinelektronik zu untersuchen.

Im ersten Teil wird ein Phänomen diskutiert, dass bei *ab initio* Rechnungen von Tunnelmagnetowiderständen auftritt. Diese *ab initio* Rechnungen wurden zum Verständnis der Grundzustandseigenschaften der Tunnelelemente durchgeführt, z.B. [22–24], aber auch, um den Ursprung des spinabhängigen Stromes zu untersuchen, z.B. [21, 25–28]. In den *ab initio* Berechnungen des Leitwertes der Minoritätselektronen treten für bestimmte Einfallsrichtungen der Elektronen auf die Grenzfläche scharfe und sehr hohe Leitwertmaxima mit voller Transmission durch die Tunnelbarriere auf, die im Majoritätsband gar nicht und bei der antiparallelen Ausrichtung der magnetischen Momente der beiden ferromagnetischen Elektroden nur viel schwächer auftauchen. Im Vergleich mit diesen Maxima ist der Tunnelstrom für andere Einfallsrichtungen bereits um mehrere Größenordnungen abgeschwächt. Daher dachte man zuerst an numerische Fehler, aber schon bald wurden diese **Hot Spots**, wie sie auch genannt werden, der erhöhten Transmission durch Grenzflächenzustände zugeschrieben. Damit konnte aber nicht die Durchquerung der Barriere ohne Intensitätsverlust erklärt werden. Erst mit den in dieser Arbeit vorgestellten, detaillierten Untersuchungen der Hot Spots können ihr Ursprung und ihre Eigenschaften verstanden werden.

Im zweiten Teil wird eine der grundlegenden Voraussetzungen der Spinelektronik untersucht: die Erzeugung eines spinpolarisierten Stromes in einem Halbleiter. Da der Spin als Informationsträger dient, muss dieser in möglichst reiner Form erzeugt werden können d.h. mit einer hohen Spinpolarisation. Bei den ersten Experimenten zur elektrischen **Spininjektion** konnte allerdings keine oder nur eine sehr kleine Spinpolarisation von unter 1% nachgewiesen werden [29–32]. Der Grund für die negativen Ergebnisse wurde 2000 von Schmidt und Mitarbeitern [33] gegeben: Aufgrund der viel geringeren Leitfähigkeit im Halbleiter gegenüber der im Ferromagneten ist eine diffusive Spininjektion nicht möglich. Dies schien ein großer Rückschlag für die Spinelektronik zu sein. Allerdings stellte sich bald heraus, dass dieses “fundamentale Hindernis” nicht so fundamental ist, da etwa ein Jahr später Rashba [34] und unabhängig davon Fert und Jaffrès [35] zeigen konnten, dass die Spininjektion doch möglich ist, wenn eine spinabhängige Tunnelbarriere an der Grenzfläche eingefügt wird. Diese bestimmt dann aufgrund des hohen spinabhängigen Widerstands den gesamten spinpolarisierten Stromtransport in der Heterostruktur. Inzwischen ist die Spininjektion auch erfolgreich experimentell selbst bei Raumtemperaturen von Fe(001) in GaAs nachgewiesen worden. Dabei stieg in den letzten zwei Jahren die erreichte Spinpolarisation im Halbleiter rasant von 2% in 2001 [36] auf 32% in diesem Jahr [37] an.

In dieser Arbeit wird die Spininjektion von Fe nach ZnSe und GaAs im ballistischen Grenzfall untersucht. In diesem Transportregime gibt es keine inelastische und inkohärente Streuung und somit kein “fundamentales Hindernis” [33]. Dafür werden die quantenmechanischen Eigenschaften des Stromtransports sehr wichtig und entscheidend. Nur durch Berücksichtigung der Symmetrie der d Bänder im Fe, die z.B. in analytischen Modellen mit ebenen Wellen nicht berücksichtigt wird, kann ein nahezu 100% spinpolarisierter Strom im Halbleiter erzeugt werden. Dabei werden Schichtstrukturen mit über 300 Atomen untersucht, was die Leistungsfähigkeit der Dichtefunktionaltheorie zusammen mit der hier

benutzten Tight Binding KKR Methode verdeutlicht. Da in der diffusiven Spininjektion der Transport durch eine Tunnelbarriere in der Regel ballistisch ist, werden die hier erhaltenen Ergebnisse auch für den diffusiven Transport durch eine Tunnelbarriere diskutiert. Zusammen mit den experimentellen Erfolge der letzten Jahre zeigen unsere Ergebnisse, dass das Problem der Spininjektion voraussichtlich in absehbarer Zeit gelöst werden kann.

An dieser Stelle wird der Inhalt der Arbeit vorgestellt. Zunächst werden die Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie in **Kapitel 2** vorgestellt, auf deren Basis die *ab initio* Rechnungen durchgeführt werden. In **Kapitel 3** wird gezeigt, wie die Kohn-Sham Gleichungen der Dichtefunktionaltheorie mit Hilfe der abgeschirmten Korringa-Kohn-Rostocker Green-Funktions-Methode gelöst werden.

Die zentrale Größe in dieser Arbeit ist der ballistische Leitwert von Schichtstrukturen, der in **Kapitel 4** diskutiert wird. Nach einer Einleitung zum ballistischen Transport wird der ballistische Leitwert im Streuformalismus von Landauer und Büttiker vorgestellt. Anschließend wird die lineare Antwort Theorie des Leitwerts behandelt. In diesem Formalismus kann er durch einen Green-Funktions Ausdruck angegeben werden. Diese Formel wird im letzten Teil des Kapitels auf die hier betrachtete Schichtgeometrie angepasst, mit der die Leitwerte in dieser Arbeit berechnet werden. Zu diesem Kapitel gehören auch die drei Anhänge der Arbeit. Im **Anhang A** wird der Leitwert in der linearen Antwort Theorie nach Baranger und Stone [38] abgeleitet. In den beiden folgenden Anhängen werden Testrechnungen zur Leitwertbestimmung vorgestellt. Im **Anhang B** wird der Einfluss von evaneszenten Zuständen auf den Leitwert diskutiert und im **Anhang C** an zwei Beispielen gezeigt, dass bei Einheitszellen mit mehr als einer Monolage der Leitwert über alle Monolagen der Einheitszelle oder ein ganzzahliges Vielfaches davon gemittelt werden muss.

In **Kapitel 5** werden die Untersuchungen zu den Hot Spots aus *ab initio* Rechnungen des Stromtransports in TMR Heterostrukturen vorgestellt. Sie werden mit Hilfe eines einfachen, analytischen Modells sowie detaillierten *ab initio* Rechnungen mit einer Vakuum Tunnelbarriere untersucht. Damit kann die vollständige Transmission durch die Barriere sowie die beobachteten Eigenschaften als ein Resonanzeffekt zwischen den Grenzflächenzuständen auf beiden Seiten der Barriere verstanden werden. Weiter wird gezeigt, dass das analytische Modell qualitativ sehr gut die Hot Spots in *ab initio* Rechnungen beschreibt.

In **Kapitel 6** wird die ballistische Injektion eines spinpolarisierten Stromes von Fe in ZnSe und GaAs untersucht. Die Spininjektion wird mit drei Injektionsprozessen an (001), (111) und (110) orientierten Fe/Halbleiter Strukturen untersucht: (i) die Injektion von heißen Elektronen oberhalb der Fermienergie, (ii) die Injektion von thermischen Elektronen an der Fermienergie ohne Schottkybarriere und (iii) mit einer Schottkybarriere an der Grenzfläche. Dabei wird bei (001) orientierten Heterostrukturen eine symmetriebedingte hohe Spinpolarisation von nahezu 100% erreicht. Da bei der diffusiven Spininjektion durch eine dünne Tunnelbarriere die Durchquerung der Barriere ballistisch erfolgen kann, sind die hier erhaltenen Ergebnisse auch wichtig und interessant für die diffusive Spininjektion. In diesem Kapitel wird kurz auf die Experimente zur Spininjektion eingegangen und mit den Ergebnissen dieser Arbeit verglichen.

Im letzten **Kapitel 7** werden die wichtigsten Ergebnisse der Arbeit zusammengefasst.

Kapitel 2

Dichtefunktionaltheorie

Zur Berechnung der elektronischen Struktur des Festkörpers wird in dieser Arbeit die Dichtefunktionaltheorie (DFT) verwendet. Ihre Grundlagen werden in diesem Kapitel diskutiert. Die DFT hat sich als Standardmethode zur *ab initio*¹ Berechnung der elektronischen und auch strukturellen Eigenschaften von Molekülen und besonders von Festkörpern etabliert.

Die grundlegende Idee der DFT ist, dass die Energie des Grundzustands und dessen Eigenschaften vollständig durch die Elektronendichte $n_0(\mathbf{r})$ bestimmt sind, was in Abschnitt 2.2 an Hand des Theorems von Hohenberg und Kohn gezeigt wird. Das bedeutet eine starke Vereinfachung, da nicht mehr die vollständige antisymmetrische Wellenfunktion $\Psi_A(\mathbf{x})$, sondern lediglich die Elektronendichte, die nur von den drei Ortskoordinaten abhängt, in die Rechnungen eingeht. Hohenberg und Kohn leiten für die Grundzustandsenergie $E[n]$ als Funktional der Einteilchendichte $n(\mathbf{r})$ ein Variationsverfahren ab, das es erlaubt, die Grundzustandsenergie E_0 als absolutes Minimum von $E[n]$ und die Grundzustandsdichte $n_0(\mathbf{r})$ aus den dazugehörigen Euler-Lagrange Gleichungen zu bestimmen. Kohn und Sham haben gezeigt, dass diese sogenannten Kohn-Sham Gleichungen die Struktur von Einteilchen-Schrödingergleichungen in einem effektiven Potential annehmen. Diese Ähnlichkeit mit dem Einteilchenproblem ist aber zunächst formaler Natur, da alle Probleme des N -Teilchenproblems in einem unbekannten Austausch-Korrelations-Funktional $E_{xc}[n]$ verborgen sind, für das erst brauchbare Näherungen abgeleitet werden müssen. Die in dieser Arbeit verwendete Näherung wird im letzten Abschnitt des Kapitels vorgestellt: die lokale Dichtenäherung² (LDA). Die Änderung für spinabhängige Systeme wird ebenfalls kurz diskutiert.

2.1 Einleitung

Möchte man die elektronische Struktur eines Festkörpers berechnen, so führt dies auf ein unlösbares Vielteilchenproblem. Es wird in der Regel zuerst dahingehend vereinfacht, dass

¹*Ab initio* (lateinisch: von Anfang an): Ohne anzupassende Parameter

²Englisch: *Local Density Approximation*

die Bewegung der Kerne von der der Elektronen getrennt wird. Dies wird dadurch motiviert, dass die Elektronenmasse über 2000 mal kleiner als die der Kerne ist und sich daher die Elektronen viel schneller bewegen als die Kerne. Die Kerne ruhen praktisch für die Elektronen, und andererseits können die Kerne den Elektronen nicht folgen, sondern bemerken nur eine zeitlich gemittelte Elektronenwolke. In dieser Arbeit wird die statische Näherung verwendet, die davon ausgeht, dass sich die Atomkerne in der Gleichgewichtsposition befinden.

Für das Elektronensystem mit den Kernpositionen als feste Parameter bleibt folgender N -Teilchen Hamiltonoperator zu lösen (in Ortsdarstellung)

$$H(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = - \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^N V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i). \quad (2.1)$$

In dieser Arbeit werden atomare Einheiten benutzt, bei denen $\hbar = 1$, $m_e = 1/2$ und $e^2 = 2$ gesetzt werden. Damit ergeben sich Längen in Einheiten des Bohrschen Radius³ 1a.u. = 0.529177Å und Energien in Rydberg 1Ryd = 13.6058eV.

Der erste Term auf der rechten Seite ist der Operator der kinetische Energie T , der zweite beschreibt die Elektron-Elektron Wechselwirkungen U_{ee} und der dritte ist das äußere Potential $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, hier das Coulombpotential der positiv geladenen Kerne. In (2.1) werden nur rein elektrostatische Wechselwirkungen angenommen, d.h. die Elektronenbewegungen erzeugen keine magnetischen Felder. Weiter werden alle relativistischen Effekte vernachlässigt. Der Spin S und das Bahndrehmoment L sind somit entkoppelt, und es gibt keine Spin-Bahn-Wechselwirkung. Der Spin stellt daher eine Erhaltungsgröße dar, d.h. er vertauscht mit dem Hamiltonoperator (2.1).

Dieser Vielteilchen-Hamiltonoperator (2.1) ist analytisch nicht und auch näherungsweise nur schwer lösbar. Aufgrund des Pauli-Prinzips müssen die Lösungen des Hamiltonoperators vollständig antisymmetrische Wellenfunktionen sein. Eine solche kann als Produktansatz von Einteilchenwellenfunktionen $\varphi_{\alpha_n}(\mathbf{x}_m)$, dargestellt durch eine Slaterdeterminante, aufgebaut werden

$$\Psi_A(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det_{n,m} |\varphi_{\alpha_n}(\mathbf{x}_m)|, \quad (2.2)$$

wobei $\mathbf{x}_m = (\mathbf{r}_m, \sigma_m)$ die Orts- und Spinkoordinate und $\alpha_n = (m_n, s_n)$ die Orts- und Spinquantenzahl sind.

Eine Möglichkeit, den Grundzustand des mit (2.1) beschriebenen Systems zu bestimmen, besteht darin, eine vollständig antisymmetrische Wellenfunktion als Testfunktion anzunehmen und den Hamiltonoperator über ein Variationsverfahren zu lösen. Dies führt auf die Hartree-Fock Gleichungen. Sie sind die Bestimmungsgleichungen der Einteilchenwellenfunktionen in (2.2), die die formale Struktur einer Einteilchen Schrödingergleichung mit einem effektiven Potential besitzen. Die Hartree-Fock Gleichungen sind allerdings numerisch aufgrund des nicht-lokalen Charakters nur sehr aufwendig zu lösen. Selbst die so bestimmte Slaterdeterminante des Grundzustandes ist nicht exakt, da nur die Korrelationen

³Englisch: *Atomic unit*, a.u.

aufgrund des Fermiloches und keine wegen der Coulombabstoßung berücksichtigt werden [39]. Dies kann durch eine Linearkombination von Slaterdeterminanten, d.h. verschiedenen Konfigurationen, verbessert werden und wird *configuration interaction* (CI) genannt. Dieses Verfahren ist aber sehr aufwendig, da der Grundzustand nur einer von vielen Konfigurationen mit vergleichbarer Energie ist und die Anzahl der benötigten Konfigurationen stark mit der Zahl der Elektronen ansteigt [40]. Mit dieser Methode lassen sich mit hoher Genauigkeit nur Systeme mit wenigen Elektronen lösen.

Um trotzdem Festkörper mit vielen Atomen *ab initio* zu berechnen, wird im Folgenden eine Methode vorgestellt, die die Grundzustandseigenschaften nicht über die Wellenfunktion Ψ_A , sondern über die viel einfachere Funktion der Elektronendichte $n(\mathbf{r})$ beschreibt.

2.2 Theorem von Hohenberg und Kohn

In diesem Abschnitt wird der Beweis des Theorems von Hohenberg und Kohn [41] nach Levy [42] skizziert. Die Elektronendichte ist definiert als

$$n(\mathbf{r}) = \left\langle \Psi_A(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \left| \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right| \Psi_A(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \right\rangle. \quad (2.3)$$

In dem Beweis von Levy wird nur vorausgesetzt, dass jede bei der Variation der Gesamtenergie zugelassene Elektronendichte durch eine vollständig antisymmetrische, normierte N -Teilchenwellenfunktion nach (2.3) erzeugt werden kann: $\Psi_A(\mathbf{x}) \rightarrow n(\mathbf{r})$. Nach Levy lautet das zu minimierende Energiefunktional (im Folgenden wird der Index A für vollständig antisymmetrische Wellenfunktionen weggelassen)

$$E[n] = \min_{\Psi \rightarrow n(\mathbf{r})} \langle \Psi | H | \Psi \rangle, \quad (2.4)$$

wobei die zu variierende Wellenfunktion Ψ vollständig antisymmetrisch sein muss und nach (2.3) die vorgegebene Dichteverteilung $n(\mathbf{r})$ reproduzieren muss.

Es sei Ψ_0 die Grundzustandswellenfunktion mit der Grundzustandsenergie E_0 . Ψ_0 erzeugt nach (2.3) die gesuchte Grundzustandsdichte $n_0(\mathbf{r})$ und ist daher bei der Minimumsuche zugelassen. Deshalb kann das Minimum über alle zugelassenen Wellenfunktionen nach oben abgeschätzt werden durch

$$E[n_0] = \min_{\Psi \rightarrow n_0(\mathbf{r})} \langle \Psi | H | \Psi \rangle \leq \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle = E_0. \quad (2.5)$$

Andererseits gilt nach dem Ritzschen Variationsverfahren, dass die Grundzustandsenergie das Minimum des Energiefunktionals $E[\Psi] = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ darstellt, wenn alle Wellenfunktionen Ψ aus dem entsprechenden Hilbertraum zugelassen werden. Da hier die Einschränkung gilt, dass nur die Wellenfunktionen Ψ betrachtet werden, die die Dichte $n(\mathbf{r})$ erzeugen, gilt für beliebige Dichten

$$E[n] = \min_{\Psi \rightarrow n(\mathbf{r})} \langle \Psi | H | \Psi \rangle \geq \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle = E_0. \quad (2.6)$$

Somit gilt nach Gleichung (2.5) und (2.6)

$$E[n_0] = E_0. \quad (2.7)$$

In dem Beweis von Levy muss die Dichte $n(\mathbf{r})$ lediglich durch eine vollständig antisymmetrische Wellenfunktion erzeugt werden können. Weiter kann der Grundzustand entartet sein. In dem Originalbeweis von Hohenberg und Kohn [41] wird vorausgesetzt, dass der Grundzustand nicht entartet ist und dass es ein äußeres Potential $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ gibt, welches die Dichte $n(\mathbf{r})$ als Grundzustandsdichte besitzt.

Die Grundzustandsenergie ist sodann das Minimum des Funktional $E[n]$, dass über die notwendige Bedingung für einen Extremwert bestimmt wird

$$\delta E[n] = 0, \quad (2.8)$$

mit der Teilchenzahlerhaltung als Randbedingung

$$\int n(\mathbf{r}) d^3r = N. \quad (2.9)$$

Die Minimierung des Energiefunktional enthält zwei Minimierungsprozesse: für jede Testdichte $n(\mathbf{r})$ muss die vollständig antisymmetrische Wellenfunktion Ψ gesucht werden, die das Energiefunktional $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ minimiert und die Testdichte $n(\mathbf{r})$ erzeugt. Anschließend wird über den zweiten Minimierungsprozess das Minimum von $E[n]$ für alle Testdichten gefunden. Die Teilchenzahlerhaltung wird über einen Lagrangeparameter μ bei der Minimierung berücksichtigt

$$\delta \left\{ E[n] - \mu \left[\int n(\mathbf{r}) d^3r - N \right] \right\} = 0. \quad (2.10)$$

Somit stellt der Lagrangeparameter μ das chemische Potential dar

$$\frac{\delta E[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = \mu. \quad (2.11)$$

2.3 Kohn-Sham Gleichung

Während das Theorem von Hohenberg und Kohn sicherstellt, dass der Grundzustand eindeutig durch die Grundzustandsdichte bestimmt ist, wird in diesem Abschnitt ein expliziter Ausdruck für die Berechnung des Funktional und der Elektronendichte gegeben.

Der Vorläufer der DFT, die Thomas-Fermi Näherung [43, 44], hat das Energiefunktional $E^{\text{TF}}[n]$ in einen kinetischen Anteil $T^{\text{TF}}[n]$, einen Beitrag durch die Elektron-Elektron Wechselwirkungen $U[n]$ (in Hartree-Näherung) und einen Anteil durch das äußere Feld $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ aufgeteilt

$$E^{\text{TF}}[n] = T^{\text{TF}}[n] + U[n] + \int V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d^3r. \quad (2.12)$$

Dabei wird die kinetische Energie T^{TF} durch die kinetische Energie von freien Elektronen beschrieben, die dieselbe Elektronendichte besitzen. Es hat sich jedoch gezeigt, dass diese Näherung nicht ausreichend ist, da sich die Elektronendichte räumlich sehr schnell ändert und der kinetische Anteil an der Gesamtenergie in der Regel sehr groß ist, so dass ein kleiner Fehler in der kinetischen Energie einen großen Fehler in der Gesamtenergie bewirkt.

Eine deutliche Verbesserung stellt der Ansatz von Kohn und Sham [45] dar. Darin wird das Energiefunktional aufgespalten in

$$E[n] = T_s[n] + U[n] + \int V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d^3r + E_{\text{xc}}[n]. \quad (2.13)$$

Im Gegensatz zur Thomas-Fermi Theorie wird die kinetische Energie T durch die kinetische Energie T_s von unabhängigen Elektronen in einem beliebigen Einteilchenpotential ersetzt. Die Korrekturen zur kinetischen Energie T aufgrund der Elektron-Elektron Wechselwirkung werden dabei formal in dem Austausch-Korrelations-Funktional $E_{\text{xc}}[n]$ verborgen. Da in dieser Formulierung für die kinetische Energie T_s die Elektronen nicht wechselwirken, kann die Gesamtwellenfunktion durch eine einzige Slaterdeterminante aus Einteilchenfunktionen φ_i dargestellt werden, so dass sowohl die Dichte $n(\mathbf{r})$ als auch die kinetische Energie T_s durch diese φ_i dargestellt werden kann

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (2.14)$$

Damit wird die sich in der Regel schnell ändernde kinetische Energie besser beschrieben als über die Dichte selber. Das kinetische Energiefunktional für unabhängige Elektronen lässt sich explizit angeben

$$T_s[n] = - \sum_{i=1}^N \int \varphi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \varphi_i(\mathbf{r}) d^3r. \quad (2.15)$$

In der Kohn-Sham Gleichung wird ein zusätzliches Energiefunktional eingeführt: das Austausch-Korrelations Funktional E_{xc} , das alle Austausch- und Korrelations-Effekte sowie den Anteil der kinetischen Energie enthält, der aufgrund der Näherung mit unabhängigen Elektronen nicht in T_s enthalten ist. Somit ist das Energiefunktional nach Kohn und Sham exakt, da die schwierig zu behandelnden Effekte, wie die Austausch- und Korrelations-Effekte, mit dem entsprechenden Funktional beschrieben werden. Im nächsten Abschnitt wird die hier verwendete Näherung für das Austausch-Korrelations-Funktional erläutert.

Das Coulomb-Funktional $U[n]$ enthält die klassische Coulombwechselwirkung

$$U[n] = \iint \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r d^3r'. \quad (2.16)$$

Dieser Term beinhaltet die (unphysikalische) Selbstenergie der Elektronen, die aber in dem Austausch-Korrelations-Funktional, wenn es exakt bekannt ist, genau wieder abgezogen wird.

Mit Hilfe der Darstellungen (2.14) für die Dichte und (2.15) für die kinetische Energie T_s durch Einteilchenfunktionen φ_i kann das Variationsverfahren nach der Dichte $n(\mathbf{r})$ in ein Variationsverfahren nach den Einteilchenwellenfunktionen umformuliert werden. Die Normierung der φ_i kann über einen Lagrangeparameter ϵ_i ($i = 1, \dots, N$) berücksichtigt werden

$$(-\nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r})) \varphi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

mit dem effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{\text{xc}}[n]}{\delta n(\mathbf{r})}. \quad (2.18)$$

Die $\varphi_i(\mathbf{r})$ sollen dabei die Dichte $n(\mathbf{r})$ nach Gleichung (2.14) erzeugen. Damit wurde erreicht, dass der komplizierte N -Teilchen Hamiltonoperator (2.1) formal auf ein Einteilchenproblem in einem effektiven Potential reduziert wird. Die Gleichung (2.17) hat die Form einer Einteilchen Schrödingergleichung. Allerdings haben die Lagrangeparameter ϵ_i und die, die Dichte $n(\mathbf{r})$ aufbauende Einteilchenwellenfunktionen $\varphi_i(\mathbf{r})$ keine direkte physikalische Bedeutung. Da die Dichte $n(\mathbf{r})$ selbst in das effektive Potential (2.18) eingeht, müssen die Kohn-Sham Gleichungen iterativ gelöst werden. In Kapitel 3 wird die hier benutzte Methode vorgestellt.

2.4 Spinabhängige Dichtefunktionaltheorie

Einige Festkörper, wie Fe oder Co, besitzen einen Grundzustand, bei dem die beiden Spinrichtungen nicht entartet sind. Das kann anschaulich mit dem Energiegewinn bei der Parallelstellung der Spins durch die Austauschwechselwirkung erklärt werden. Ist der Energiegewinn größer als die damit verbundene höhere kinetische Energie durch Besetzung energetisch höherer Zustände aufgrund des Pauli Prinzips (größere Fermikugel im homogenen Elektronengas), so erhält man einen spinabhängigen Grundzustand.

In diesem Abschnitt wird die Verallgemeinerung der DFT auf eine spinabhängige Dichtefunktionaltheorie vorgestellt. Dazu wird die Magnetisierung $m(\mathbf{r})$ als zweite unabhängige Variationsgröße neben der Elektronendichte $n(\mathbf{r})$ eingeführt. Ist $n^+(\mathbf{r})$ die Elektronendichte der Majoritätselektronen ($S_z = +\hbar/2$) und $n^-(\mathbf{r})$ die der Minoritätselektronen ($S_z = -\hbar/2$), so gilt

$$n(\mathbf{r}) = n^+(\mathbf{r}) + n^-(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

$$m(\mathbf{r}) = n^+(\mathbf{r}) - n^-(\mathbf{r}). \quad (2.20)$$

Es kann auch nach $n^+(\mathbf{r})$ und $n^-(\mathbf{r})$ variiert werden. Die Herleitung verläuft analog zum spinunabhängigen Fall. Es ergeben sich folgende spinabhängigen Kohn-Sham Gleichungen

$$(-\nabla^2 + V_{\text{eff}}^{\pm}(\mathbf{r})) \varphi_i^{\pm}(\mathbf{r}) = \epsilon_i^{\pm} \varphi_i^{\pm}(\mathbf{r}) \quad (2.21)$$

mit dem spinabhängigen, effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}^{\pm}(\mathbf{r}) = \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{\text{xc}}[n^+, n^-]}{\delta n^{\pm}(\mathbf{r})}. \quad (2.22)$$

Wie man aus dem effektiven Potential erkennt, steckt die Spinabhängigkeit des Grundzustands in dem Austausch-Korrelations-Funktional, da der Magnetismus von der Austauschwechselwirkung hervorgerufen wird. Diese Spinabhängigkeit ist die Ursache für die spontane Magnetisierung (kollektive Ausrichtung der magnetischen Momente ohne ein äußeres magnetisches Feld) in einigen Festkörpern.

2.5 Lokale Spindichtenäherung

Die Aufteilung des Energiefunktionals in $T_s[n]$ und $E_{xc}[n]$ nach Kohn-Sham stellt im Prinzip keine Näherung dar, da die komplizierten und in der Regel unbekannten Vielteilcheneffekte in das Austausch-Korrelations-Funktional $E_{xc}[n]$ (bzw. $E_{xc}[n^+, n^-]$ im spinabhängigen Fall) geschoben werden. Damit bleibt die Aufgabe, eine Näherung für dieses Funktional zu finden. Da dessen Energie in der Regel viel kleiner als die kinetische Energie und die Coulombwechselwirkung ist, wirkt sich ein Fehler in diesem Funktional nicht so drastisch aus wie bei der Thomas-Fermi Theorie in der kinetischen Energie. Die einfachste und sehr häufig verwendete Näherung ist die lokale Dichtenäherung (LDA) bzw. die lokale Spindichtenäherung⁴ (LSDA). Hierbei wird das Funktional durch die Austausch-Korrelations-Energie eines homogenen (spinpolarisierten) Elektronengases mit einer konstanten Dichte n bzw. einer konstanten spinpolarisierten Dichte n^+ und n^- ersetzt

$$E_{xc}[n] \cong E_{xc}^{\text{LDA}}[n] = \int n(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}(n(\mathbf{r})) d^3r \quad (2.23)$$

bzw. in der LSDA

$$E_{xc}[n^+, n^-] \cong E_{xc}^{\text{LSDA}}[n^+, n^-] = \int n(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}(n^+(\mathbf{r}), n^-(\mathbf{r})) d^3r. \quad (2.24)$$

Es hat sich gezeigt, dass die LDA bzw. LSDA für viele Grundzustandseigenschaften gute Ergebnisse liefert. Das Funktional $\epsilon_{xc}(n)$ für ein homogenes Elektronengas lässt sich mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo Simulationen numerisch bestimmen. Die in dieser Arbeit vorgestellten Rechnungen sind alle mit der Parametrisierung von Vosko, Wilk und Nusair [46] durchgeführt, die auf einer Monte-Carlo-Simulation von Ceperley und Alder [47] beruhen.

2.5.1 Diskussion der Lokalen Spindichtenäherung

Viele der in LDA bzw. LSDA Näherung berechneten Grundzustandseigenschaften stimmen gut mit dem Experiment überein. Allerdings gibt es elektronische Eigenschaften, die in der LDA bzw. LSDA schlecht beschrieben werden. Ein auch in dieser Arbeit wichtiges Beispiel ist die Energiebandlücke in Halbleitern. Diese ist in den Rechnungen etwa um die Hälfte kleiner als die gemessene Bandlücke. Allerdings ist die Bandlücke keine Grundzustandseigenschaft, da sie die Energiedifferenz zwischen dem ersten angeregten Zustand und dem

⁴Englisch: *Local Spin Density Approximation*

Grundzustand darstellt. Als Ursache für diesen relativ großen Fehler wird eine Unstetigkeit des Austausch-Korrelations-Funktional angegeben. Ob dies ein Fehler der LDA bzw. LSDA oder der Kohn-Sham Gleichungen ist, ist noch nicht vollständig geklärt.

Weiter wird der Grundzustand von stark lokalisierten Elektronen, wie z.B. in Übergangsmetall-Oxiden (Mott-Isolatoren), schlecht beschrieben. Die Ursache hierfür ist, dass die Elektronen in lokalisierten Orbitalen durch das klassische Coulombwechselwirkungsfunktional $U[n]$ fälschlicherweise eine zusätzliche Selbstenergie erhalten, die durch das Austausch-Korrelations-Funktional des homogenen Elektronengases nicht wieder ausreichend korrigiert wird. Dieser Fehler kann durch die Methode der Selbstenergiekorrektur⁵ (SIC) verbessert werden [48]. Dabei wird nicht nur die kinetische Energie $T_s[n]$ durch Einteilchenwellenfunktionen, die die Elektronendichte aufbauen, beschrieben, sondern auch das Austausch-Korrelations-Funktional wird abhängig von den Orbitalen. Damit lassen sich die lokalisierten Orbitale besser beschreiben und die Selbstenergie genauer korrigieren.

Abgesehen von der falschen Bandlücke beschreibt die LDA die hier benötigten Halbleitereigenschaften, wie z.B. die Symmetrie und die Dispersion der Bänder, sehr gut.

⁵Englisch: *Self Interaction Correction*

Kapitel 3

KKR Green-Funktions-Methode

In diesem Kapitel wird die Korringa-Kohn-Rostocker (KKR) Methode [49, 50] vorgestellt, mit der die Kohn-Sham Gleichungen (2.17) in dieser Arbeit gelöst werden. In dieser Methode wird die Einteilchen Green-Funktion über einen Mehrfachstreualgorithmus bestimmt, aus der sich die Elektronendichte sowie andere Grundzustandseigenschaften, wie z.B. der Leitwert, berechnen lassen.

Viele *ab initio* Methoden basieren darauf, möglichst gute und effiziente Basissätze für die Einteilchenwellenfunktion $\varphi_i(\mathbf{r})$ zu finden und damit die Kohn-Sham Gleichung (2.17) zu lösen. Eine andere Möglichkeit besteht darin, nicht die $\varphi_i(\mathbf{r})$ zu bestimmen, sondern die Kohn-Sham Differentialgleichungen für die Einteilchen Green-Funktion zu lösen, die auch die gesamte Information über das System enthält. Somit bleibt die Aufgabe, wie die Green-Funktion berechnet werden kann. In der KKR Methode wird die elektronische Struktur verstanden als stationärer Zustand der Vielfachstreuungen der Wellenfunktionen an den Atomen bzw. den effektiven Potentialen der Kohn-Sham Gleichungen. Damit wird motiviert, die Green-Funktion aus den Lösungen der Einzelstreuprozesse unter Verwendung der Vielfachstreutheorie aufzubauen. Die Green-Funktions-Methode hat weiter den Vorteil, dass sie von einem beliebigen Referenzsystem ausgehen kann [51]. Es wird gezeigt, wie damit ein Tight-Binding-artiger Formalismus abgeleitet werden kann, der für viele Probleme von Vorteil sein kann. In einer zweidimensionalen Lagengeometrie wird damit eine Methode erreicht, bei der die benötigte Rechenzeit linear mit der Zahl N der nicht-äquivalenten Atomen ansteigt.

3.1 Eigenschaften der Green-Funktion

In diesem Abschnitt wird die Einteilchen Green-Funktion vorgestellt und einige ihrer Eigenschaften diskutiert. Der Einfachheit halber wird der Spin zunächst nicht berücksichtigt, da die folgenden Gleichungen für jede Spinrichtung gesondert gelöst werden können. Die Kohn-Sham Gleichungen (2.17) lauten mit dem Hamiltonoperator $H_0 = -\nabla^2$ für freie

Elektronen

$$\begin{aligned} (H_0 + V_{\text{eff}}) \psi_\alpha(\mathbf{r}) &= E_\alpha \psi_\alpha(\mathbf{r}) \\ \Leftrightarrow (H_0 - E_\alpha) \psi_\alpha(\mathbf{r}) &= -V_{\text{eff}} \psi_\alpha(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Hierbei kann das effektive Potential V_{eff} als eine Inhomogenität der Kohn-Sham Gleichungen des freien Raumes aufgefasst werden. In diesem Fall kann die inhomogene Differentialgleichung mit Hilfe der Green-Funktions-Methode gelöst werden, da die homogene Lösung (freie Elektronen) bekannt ist [52]

$$(H_0 - E)G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.2)$$

Formal beschreibt die Green-Funktion die Ausbreitung der Wellenfunktion eines Elektrons der Energie E am Ort \mathbf{r} , die durch eine Quelle $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ am Ort \mathbf{r}' erzeugt wird. Die Green-Funktion des gestörten Systems mit $H_{\text{eff}} = H_0 + V_{\text{eff}}$ lautet

$$(H_{\text{eff}} - E)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.3)$$

Sie ist über die Dysongleichung mit der Green-Funktion G^0 verknüpft

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) + \int G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; E) V_{\text{eff}}(\mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; E) d^3r''. \quad (3.4)$$

Die Einteilchen-Wellenfunktionen des gestörten Systems $\psi(\mathbf{r})$ können analog mit einer Lippmann-Schwinger Gleichung aus den $\psi^0(\mathbf{r})$ des freien Raumes gelöst werden

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi^0(\mathbf{r}) + \int G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r', \quad (3.5)$$

wobei ψ^0 die Randbedingung für einlaufende Wellen erfüllen muss. Die gestörte Green-Funktion lässt sich auch mit Hilfe der Lösungen der Kohn-Sham Gleichungen (2.17) und deren Eigenwerte E_α über die Spektraldarstellung ausdrücken

$$G^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(\mathbf{r}) \psi_\alpha^*(\mathbf{r}')}{E - E_\alpha \pm i\epsilon}. \quad (3.6)$$

Die Green-Funktion über die Spektraldarstellung zu berechnen, besitzt aber den Nachteil, dass die Eigenfunktionen für alle Energien E_α , also auch für solche hoch über der Fermienergie, bestimmt werden müssen. In der Spektraldarstellung stellt G^+ die retardierte und G^- die avancierte Green-Funktion dar. Erstere beschreibt auslaufende und letztere (unphysikalische) einlaufende Wellen. Im Folgenden wird nur die retardierte Green-Funktion benötigt. Mit Hilfe der Spektraldarstellung (3.6) und der Dirac Identität

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\epsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x), \quad (3.7)$$

wobei

$$P\left(\frac{1}{x}\right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{1}{x} dx \quad (3.8)$$

den Cauchyschen Hauptwert bezeichnet, kann die wichtige Beziehung zwischen der Green-Funktion und der energie- und ortsabhängigen Elektronendichte $n(\mathbf{r}; E)$ angegeben werden

$$n(\mathbf{r}; E) = -\frac{2}{\pi} \text{Im } G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E). \quad (3.9)$$

Hierbei ist die Spinentartung durch den Faktor 2 bereits berücksichtigt. Damit lässt sich die energieabhängige Zustandsdichte

$$n(E) = \int n(\mathbf{r}; E) d^3r \quad (3.10)$$

und die in der Dichtefunktionaltheorie grundlegende Größe der Elektronendichte bestimmen

$$n(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{E_F} n(\mathbf{r}; E) dE. \quad (3.11)$$

Zum Lösen des Energieintegrals gibt es eine sehr leistungsfähige Integration in der komplexen Energieebene [53], die die Analytizität der retardierten Green-Funktion auf dem physikalischen Blatt ausnutzt (in diesem Fall muss der Imaginärteil außerhalb des komplexen Energieintegrals gebildet werden). Mit Hilfe der komplexen Integration wird nur ein Bruchteil an Energiestützstellen benötigt. In den Rechnungen zur Bestimmung des Grundzustandes wurde in dieser Arbeit auch eine endliche Temperatur des Elektronensystems berücksichtigt, indem die Zustände nach der Fermi-Dirac Verteilung $f(E)$ besetzt werden

$$n(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} f(E) n(\mathbf{r}; E) dE. \quad (3.12)$$

Die Fermi-Dirac Verteilung besitzt in der Nähe der Fermienergie in der komplexen Energieebene Pole erster Art (Matsubara Pole) an den Positionen ($n = 1, 2, \dots$)

$$z_n = E_F + i\pi(2n - 1)k_B T, \quad (3.13)$$

deren Residuen bei der Energieintegration bestimmt werden müssen. Die Verwendung der Fermiverteilung in Verbindung mit der Methode der Kontourintegration bietet wesentliche numerische Verbesserungen für die Grundzustandsrechnungen, da die Green-Funktion nur für komplexe Energien benötigt wird, was einer Lorentzverbreiterung der Energieabhängigkeit bedeutet (der am nächsten an der reellen Achse liegende Punkt ist $E_F + i\pi k_B T$). Die Fermienergie wird in den Iterationszyklen so bestimmt, dass im Kristall Ladungsneutralität herrscht. Die Berechnung des Leitwerts erfolgt in dieser Arbeit für $T \rightarrow 0$. Es wird allerdings aus numerischen Gründen auch hier ein kleiner Imaginärteil $E = E_F + i\delta$ der Energie gewählt.

3.2 Bestimmung der Einfach-Streulösungen

Wie bereits erwähnt, wird in der KKR Methode die elektronische Struktur als Mehrfachstreuung der Wellenfunktionen an den Atomen angesehen. Daher wird in diesem Abschnitt der Einzelstreuprozess untersucht, mit dessen Lösungen die Green-Funktion dargestellt wird. In dieser Arbeit werden durchweg ASA¹ Potentiale verwendet, die nur eine radiale Abhängigkeit zeigen und dasselbe Volumen wie die entsprechende Wigner-Seitz Zelle besitzen. Dadurch überlappen die Kugeln leicht im Gegensatz zu den sich berührenden Kugeln bei *Muffin Tin* Potentialen. Der Vorteil ist, dass so der Zwischenraum besser ausgefüllt wird.

Es wird ein einzelnes sphärisches Streupotential mit dem Wigner-Seitz Radius R_{WS} im leeren Raum betrachtet

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} V(r) & , r \leq R_{\text{WS}} \\ 0 & , r > R_{\text{WS}} \end{cases} \quad (3.14)$$

Da das Streupotential nur eine radiale Abhängigkeit besitzt, kann die Winkelabhängigkeit durch Verwendung von Kugelkoordinaten absepariert werden. Für die radiale Komponente muss folgende Differentialgleichung gelöst werden

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right] F_l(r; E) = 0, \quad (3.15)$$

womit sich die volle Lösung als $F_L(\mathbf{r}; E) = F_l(r; E)Y_L(\hat{\mathbf{r}})$ mit $L = (l, m)$ ergibt. $Y_L(\hat{\mathbf{r}})$ sind die reellen Kugelflächenfunktionen. Der zweite Term auf der linken Seite wird auch als Drehimpulsbarriere bezeichnet, da er ein repulsives Potential besonders für Streuwellen mit einem hohen Drehimpuls darstellt. Die Gleichung (3.15) besitzt zwei linear unabhängige Lösungen: eine reguläre Lösung mit $R_l(r) \propto r^l$ für $r \rightarrow 0$ und eine Irreguläre mit $H_l(r) \propto r^{-(l+1)}$ für $r \rightarrow 0$.

Um die reguläre und irreguläre Lösung zu berechnen, wird zunächst ein verschwindendes Streupotential (freier Raum) betrachtet, d.h. $V(r) = 0$. Hierfür sind die Lösungen analytisch bekannt: die reguläre Lösung ist die sphärische Besselfunktion $j_l(\sqrt{E}r)$ und die Irreguläre die sphärische Hankelfunktion $h_l(\sqrt{E}r)$, wobei $h_l = n_l - i j_l$ und n_l die sphärische Neumannfunktion ist [52]. Damit lautet die Green-Funktion des freien Raums

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\sqrt{E}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \sum_L Y_L(\hat{\mathbf{r}}) g_l(r, r'; E) Y_L(\hat{\mathbf{r}}') \quad (3.16)$$

$$\text{mit} \quad g_l(r, r'; E) = \sqrt{E} j_l(\sqrt{E}r_{<}) h_l(\sqrt{E}r_{>}).$$

Dabei ist $r_{<} = \min(r, r')$ und $r_{>} = \max(r, r')$. Die Lösungen für ein endliches Streupotential lassen sich über die Lippmann-Schwinger Gleichung (3.5) aus den Lösungen des

¹Englisch: *Atomic Sphere Approximation*

freien Raumes bestimmen. Dabei werden freie, einlaufende Wellen j_l als Randbedingung angenommen [52]

$$R_l(r, E) = j_l(\sqrt{E}r) + \int_0^{R_{\text{WS}}} g_l(r, r'; E) V(r') R_l(r'; E) r'^2 dr'. \quad (3.17)$$

Für $r > R_{\text{WS}}$ lässt sich die reguläre Lösung auch über die Streumatrix t berechnen

$$R_l(r; E) = j_l(\sqrt{E}r) + \sqrt{E} t_l(E) h_l(E), \quad (3.18)$$

wobei die Streumatrix t_l definiert ist als

$$t_l(E) = \int_0^{R_{\text{WS}}} j_l(\sqrt{E}r') V(r') R_l(r'; E) r'^2 dr'. \quad (3.19)$$

Die Streumatrix beschreibt somit den Streuprozess einer einlaufenden freien Welle j_l in eine gestreute Welle R_l durch das Streupotential $V(r)$. Eine analoge Behandlung der irregulären Lösung mit der Randbedingung von auslaufenden Hankelfunktionen für $r > R_{\text{WS}}$ ergibt [52]

$$H_l(r; E) = H_l^{\text{RB}}(r; E) + \int_0^{R_{\text{WS}}} g_l(r, r'; E) V(r') H_l(r'; E) r'^2 dr'. \quad (3.20)$$

Dabei ist $H_l^{\text{RB}}(r; E) = C h_l(\sqrt{E}r)$, wobei die Konstante C so zu wählen ist, dass $H_l(r; E) = h_l(\sqrt{E}r)$ für $r > R_{\text{WS}}$ gilt. Es folgt

$$H_l^{\text{RB}}(r; E) = h_l(r; E) \left[1 - \sqrt{E} \int_0^{R_{\text{WS}}} j_l(\sqrt{E}r') V(r') H_l(r'; E) r'^2 dr' \right]. \quad (3.21)$$

Die Green-Funktion des Einzelstreuers² kann analog zum freien Raum durch die beiden linear unabhängigen Lösungen des Einzelstreuprozesses dargestellt werden

$$G_s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_L Y_L(\hat{\mathbf{r}}) G_l(r, r'; E) Y_L(\hat{\mathbf{r}}') \quad (3.22)$$

$$\text{mit} \quad G_l(r, r'; E) = \sqrt{E} R_l(r_{<}; E) H_l(r_{>}; E).$$

3.3 Vielfachstreuformalismus

In diesem Abschnitt wird die Green-Funktion für eine beliebige Anordnung von Streupotentialen bestimmt. Da der Vielfachstreuprozess aus Einzelstreuprozessen aufgebaut wird,

²Englisch: *Single scattering* oder *Single site* Lösung

liegt es nahe, die Green-Funktion durch deren Lösungen darzustellen. Für die Beschreibung des Vielfachstreusystems wird die Green-Funktion in zellzentrierte Koordinaten dargestellt

$$\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r} + \mathbf{R}^n. \quad (3.23)$$

Der Ortsvektor wird aufgeteilt in einen Gittervektor zu den Atomzentren \mathbf{R}^n und in einen Vektor \mathbf{r} innerhalb des Atomvolumens V^n . Bei einer Einheitszelle mit Basis muss zusätzlich ein Stützvektor \mathbf{R}^μ innerhalb der Einheitszelle von dem Stützvektor \mathbf{R}^n zu dem Basisatom eingefügt werden. Im Folgenden wird der Übersicht halber dieser Index weggelassen. Das Potential des Systems lautet somit

$$V(\tilde{\mathbf{r}}) = \begin{cases} \sum_n V^n(r) & , r \leq R_{\text{WS}}^n \\ 0 & , \text{sonst} . \end{cases} \quad (3.24)$$

Die Definitionsgleichung für die Green-Funktion lautet für das System von Streuzentren in zellzentrierten Koordinaten

$$(-\nabla^2 + V^n(r) - E) G(\mathbf{r} + \mathbf{R}^n, \mathbf{r}' + \mathbf{R}^{n'}; E) = -\delta_{nn'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.25)$$

Zunächst wird der Einfachstreuprozess für $n = n'$, betrachtet. Die Green-Funktion G_s^n ist im letzten Abschnitt bestimmt worden (3.22)

$$G_s^n(\mathbf{r} + \mathbf{R}^n, \mathbf{r}' + \mathbf{R}^n; E) = \sqrt{E} \sum_L R_L^n(\mathbf{r}_{<}; E) H_L^n(\mathbf{r}_{>}; E) , \quad (3.26)$$

mit $R_L^n(\mathbf{r}) = R_L^n(r) Y_L(\hat{\mathbf{r}})$ und analog $H_L^n(\mathbf{r}) = H_L^n(r) Y_L(\hat{\mathbf{r}})$. Für die gesamte Green-Funktion benötigt wird zusätzlich zur Green-Funktion des Einzelstreuprozesses die Summe aller Mehrfachstreuprozesse benötigt. Dieser Anteil wird Rückstreubeitrag³ genannt und enthält nur die reguläre Lösungen $R_L^n(\mathbf{r})$, da die Quellbedingung $\delta_{nn'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ schon durch die Einzelstreulösung erfüllt ist. Somit lautet die Green-Funktion [54]

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r} + \mathbf{R}^n, \mathbf{r}' + \mathbf{R}^{n'}; E) &= \delta_{nn'} G_s^n(\mathbf{r} + \mathbf{R}^n, \mathbf{r}' + \mathbf{R}^n; E) \\ &+ \sum_{LL'} R_L^n(\mathbf{r}; E) G_{LL'}^{nn'}(E) R_{L'}^{n'}(\mathbf{r}'; E). \end{aligned} \quad (3.27)$$

Die Matrix des Rückstreubeitrages $G_{LL'}^{nn'}(E)$ wird strukturelle Green-Funktion und deren Elemente auch Strukturkonstanten genannt. Die Matrix enthält die gesamten Strukturinformationen des Systems.

Bestimmt wird die strukturelle Green-Funktion über die Dysongleichung mit dem freien Raum als Referenzsystem. Mit Hilfe der Streumatrizen des Systems t_l^n (3.19) lässt sich ein Ausdruck für die strukturelle Green-Funktion finden [52] (algebraische Dysongleichung)

$$G_{LL'}^{nn'} = G_{LL'}^{0nn'} + \sum_{n'', L''} G_{LL''}^{0nn''} t_{l''}^{n''} G_{L''L'}^{n''n'}. \quad (3.28)$$

³Englisch: *Backscattering contribution*

Die Matrixelemente der strukturellen Green-Funktion des freien Raums werden auch freie Strukturkonstanten genannt. Sie lassen sich analytisch berechnen [52] mit

$$G_{LL'}^{0nn'}(E) = 4\pi\sqrt{E} \sum_{L''} i^{l-l'+l''} C_{LL'L''} h_{l''}(\sqrt{E}|\mathbf{R}^n - \mathbf{R}^{n'}|) Y_{L''}(\widehat{\mathbf{R}^n - \mathbf{R}^{n'}}), \quad (3.29)$$

wobei die Gaunt Koeffizienten benutzt werden

$$C_{LL'L''} = \int Y_L(\hat{\mathbf{r}}) Y_{L'}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{L''}(\hat{\mathbf{r}}) d\Omega. \quad (3.30)$$

3.4 Tight Binding Formalismus

In der klassischen KKR Green-Funktions-Methode wird der freie Raum als natürliches Referenzsystem verwendet. Der Vorteil ist, dass hierfür die Lösungen analytisch bekannt sind. Allerdings hat der freie Raum einen entscheidenden Nachteil: die Wechselwirkungen zwischen den Atomen fallen nur langsam und oszillatorisch mit wachsendem Abstand ab. Aus Rechenzeitgründen wäre ein Tight Binding (TB) Formalismus vom großen Vorteil, bei dem nur die Kopplungen zu wenigen Nachbaratomen berücksichtigt werden müssten. In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie durch eine geschickte Wahl des Referenzsystems ein solcher TB- oder abgeschirmter KKR Formalismus⁴ erreicht werden kann.

Die Dysongleichung (3.28) verbindet die Strukturkonstanten des freien Raumes $G^0 = \{G_{LL'}^{0nn'}\}$ mit der strukturellen Green-Funktion des gestörten Systems $G = \{G_{LL'}^{nn'}\}$, wobei die Störung durch die Streumatrix $t = \{t_l^n\}$ beschrieben wird (in Operatorschreibweise)

$$G = G^0 + G^0 t G \quad (3.31)$$

$$= (1 - G^0 t)^{-1} G^0. \quad (3.32)$$

Die Störung kann auch über den sogenannten Streupfadoperator $\tau = \{\tau_{LL'}^{nn'}\}$ berücksichtigt werden [51]. Dieser ist definiert als

$$\tau = (t^{-1} - G^0)^{-1}. \quad (3.33)$$

und ist direkt mit der strukturellen Green-Funktion G verknüpft

$$G = G^0 + G^0 \tau G^0 \quad (3.34)$$

$$= t^{-1} \tau t^{-1} - t^{-1}. \quad (3.35)$$

Im Folgenden wird die strukturelle Green-Funktion $G^r = \{G_{LL'}^{rnn'}\}$ eines neuen Referenzsystems eingeführt, von dem aus die strukturelle Green-Funktion des realen Systems G berechnet werden soll. Es werden also zuerst die Strukturkonstanten des freien Raumes auf das neue Referenzsystem transformiert und anschließend mit einer zweiten Dysongleichung die gesuchte strukturelle Green-Funktion berechnet. Die Dysongleichung (3.31) für das neue Referenzsystem lautet

$$G^r = G^0 + G^0 t^r G^r \quad (3.36)$$

⁴Screened KKR Green-Funktions-Methode

und die zweite Dysongleichung für das reale System von dem neuen Referenzsystem G^r aus

$$G = G^r + G^r \Delta t G. \quad (3.37)$$

Wird Gleichung (3.36) in (3.37) eingesetzt und mit Gleichung (3.31) verglichen, so ergibt sich die Streumatrix Δt als Differenz zwischen den t -Matrizen des realen und des Referenzsystems

$$\Delta t = t - t^r. \quad (3.38)$$

Analog ergibt sich der neue Streupfadoperator

$$\Delta \tau = ((\Delta t)^{-1} - G^r)^{-1}. \quad (3.39)$$

Somit gilt für die gesuchte strukturelle Green-Funktion vom neuen Referenzsystem aus

$$G = G^r + G^r \Delta \tau G^r \quad (3.40)$$

$$= (\Delta t)^{-1} \Delta \tau (\Delta t)^{-1} - (\Delta t)^{-1}. \quad (3.41)$$

Bei der Transformation auf ein neues Referenzsystem werden keine Näherungen durchgeführt, so dass alle Gleichungen exakt gelten. Diese Freiheit wird nun ausgenutzt, um ein Referenzsystem zu finden, in dem die strukturelle Green-Funktion hinreichend schnell im Realraum abfällt.

Schnell, d.h. exponentiell, abfallende Wellenfunktionen erhält man in verbotenen Energiebereichen, wie z.B. in der Energielücke eines Halbleiters. Dabei fallen in der Regel die Zustände schneller ab, je größer die Bandlücke ist. Bei dem Referenzsystem des freien Raumes (freie Elektronen) gilt dies für negative Energien $E < 0$. Das motiviert als neues Referenzsystem ein konstantes, abstoßendes Potential zu wählen. Ist dieses Potential höher als typische Energien der Valenzelektronen (≈ 1 Ryd), so werden die Wellenfunktionen und somit auch die Wechselwirkungen im neuen Referenzsystem in diesem Energiebereich exponentiell gedämpft. Daher werden sphärische, nicht überlappende *Muffin Tin* Potentiale mit einem konstanten Potential von +4 Ryd als neues Referenzsystem verwendet. Es konnte gezeigt werden [51, 55], dass so die strukturelle Green-Funktion schnell exponentiell gedämpft wird und in den Rechnungen nur die Streuungen zwischen zwei Atomen mit einem Abstand von weniger als ein oder zwei Gitterkonstanten berücksichtigt werden müssen. Dies erlaubt es, die erste Dysongleichung (3.36), d.h. die Transformation vom freien Raum zum neuen, repulsiven Referenzsystem, im Realraum auszuführen. Dabei geht die Summe in (3.36) nur über die Atome eines endlichen TB-Clusters, da die strukturelle Green-Funktion im neuen repulsiven Referenzsystem exponentiell abfällt. In dieser Arbeit sind zwischen 19 und 65 Atome im TB-Cluster enthalten. Die zweite Dysongleichung (3.37) wird in den Fällen, in denen eine Translationssymmetrie vorliegt, durch eine Fouriertransformation im reziproken Raum ausgeführt. Dies wird für die hier betrachteten Geometrien im nächsten Abschnitt diskutiert.

3.5 Geometrien

3.5.1 Dreidimensionale Bulk Geometrie

Im Bulk⁵ Kristall liegt eine dreidimensionale Translationssymmetrie vor, die mit Hilfe einer Fouriertransformation berücksichtigt wird. Daher wird die Dysongleichung (3.37) vom repulsiven Referenzsystem zum realen System im reziproken Raum ausgewertet. Dabei wird die Fouriertransformierte der strukturellen Green-Funktionen G^r des Referenzsystems benötigt, die nur vom Differenzvektor $\mathbf{R}^n - \mathbf{R}^{n'}$ abhängt

$$G_{LL'}^r(\mathbf{k}; E) = \sum_n e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}^n - \mathbf{R}^{n'})} G_{LL'}^{rnn'}(E). \quad (3.42)$$

Da der TB-Cluster eine endliche Anzahl von Atomen enthält, wird die Summe in (3.42) im Realraum ohne aufwendige Ewaldsummen ausgeführt. Die Dysongleichung (3.37) im reziproken Raum lautet [51]

$$G_{LL'}(\mathbf{k}; E) = G_{LL'}^r(\mathbf{k}; E) + \sum_{L''} G_{LL''}^r(\mathbf{k}; E) \Delta t_{L''}(E) G_{L''L'}(\mathbf{k}; E). \quad (3.43)$$

Anschließend wird die strukturelle Green-Funktion wieder in den Realraum mittels einer Brillouinonenintegration zurücktransformiert

$$G_{LL'}^{rnn'}(E) = \frac{1}{V_{\text{BZ}}} \int_{\text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}^n - \mathbf{R}^{n'})} G_{LL'}(\mathbf{k}; E) d^3k. \quad (3.44)$$

Im Selbstkonsistenzprozess wird die Elektronendichte benötigt, weshalb nur die Terme mit $n = n'$ bestimmt werden müssen. Die Brillouinonenintegration wird im irreduziblen Teil der Brillouinzone (BZ) ausgeführt, da der übrige Anteil mittels Symmetrioperationen aus dem irreduziblen Teil berechnet werden kann.

3.5.2 Zweidimensionale Geometrie

In dieser Arbeit wird u.a. der Leitwert von Schichtsystemen berechnet. Da in den Experimenten die laterale Fläche der Schichten um mehrere Größenordnungen größer als deren Dicke ist, wird in den Rechnungen eine zweidimensionale Translationssymmetrie in der Schichtebene angenommen, die durch eine Fouriertransformation berücksichtigt wird. Senkrecht zu den Schichtebenen existiert keine Translationssymmetrie, so dass die Dysongleichung für diese Richtung im Realraum gelöst werden muss. In Abbildung 3.1 ist ein solches zweidimensionales System gezeichnet. Dargestellt ist ein Schichtsystem mit zwei nicht identischen Atomen pro Monolage. Um die zweidimensionale Geometrie besser beschreiben zu können, werden die Stützvektoren (3.23) zu den Atomzentren wie folgt aufgeteilt (siehe Abbildung 3.1)

$$\mathbf{R}^n = \mathbf{R}_i + \chi_\nu, \quad (3.45)$$

⁵Volumenkristall

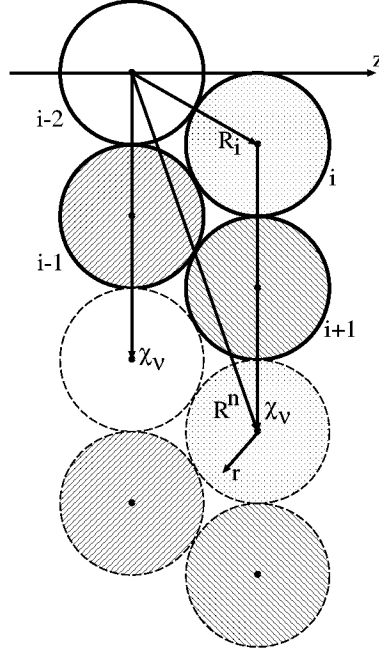


Abbildung 3.1: Zweidimensionale Geometrie mit den an diese Geometrie angepassten Stützvektoren. Der Übersicht halber sind die ASA Potentiale nicht überlappend gezeichnet. Die identischen Atome aufgrund der zweidimensionalen Translationssymmetrie sind dünn gestrichelt dargestellt. Die z Richtung steht senkrecht auf der Schichtebene (Wachstumsrichtung).

wobei \mathbf{R}_i der Stützvektor zu den nicht-äquivalenten Atomen und χ_ν der zweidimensionale Gittervektor ist. Mit dieser Indizierung lautet die Green-Funktion des realen Systems

$$G(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i + \chi_\nu, \mathbf{r}' + \mathbf{R}_{i'} + \chi_{\nu'}; E) = \delta_{ii'} \delta_{\nu\nu'} \sqrt{E} \sum_L R_L^i(\mathbf{r}_{<}; E) H_L^{i'}(\mathbf{r}_{>}; E) + \sum_{LL'} R_L^i(\mathbf{r}; E) G_{LL'}^{ii'}(E) R_{L'}^{i'}(\mathbf{r}'; E). \quad (3.46)$$

Die erste Dysongleichung (3.36) für die Transformation vom freien Raum auf das repulsive Referenzsystem lautet in dieser zweidimensionalen Geometrie

$$G_{\nu\nu'}^{ii'}(E) = G_{\nu\nu'}^{0ii'}(E) + \sum_{\substack{i''\nu'' \\ L''}} G_{\nu\nu''}^{0ii''}(E) t_{\nu''}^{i''}(E) G_{\nu''\nu'}^{i''i'}(E). \quad (3.47)$$

Für die zweite Dysongleichung (3.37) in das reale System wird die zweidimensionale Translationssymmetrie ausgenutzt. Daher hängt die strukturelle Green-Funktion nur vom relativen Abstand in der Ebene $\chi_\nu - \chi_{\nu'}$ ab. Die strukturelle Green-Funktion vom repulsiven

Referenzsystem wird mit einer zweidimensionalen Fouriertransformation in den reziproken Raum transformiert

$$G_{LL'}^{rii'}(\mathbf{k}_{\parallel}; E) = \sum_{\nu} e^{-i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{x}_{\nu} - \mathbf{x}_{\nu'})} G_{LL'}^{rii'}(E). \quad (3.48)$$

Die auszuführende Dysongleichung auf die strukturelle Green-Funktion des realen Systems lautet in dem Formalismus des Streupfadoperators (3.41) [51]

$$G_{LL'}^{ii'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = ((\Delta t)^{-1})_L^i \Delta\tau(\mathbf{k}_{\parallel})_{LL'}^{ii'} ((\Delta t)^{-1})_{L'}^{i'} - ((\Delta t)^{-1})_L^i \quad (3.49)$$

mit dem Streupfadoperator

$$\Delta\tau(\mathbf{k}_{\parallel})_{LL'}^{ii'} = \left([(\Delta t)^{-1} - G^r(\mathbf{k}_{\parallel})]^{-1} \right)_{LL'}^{ii'}. \quad (3.50)$$

Die Rücktransformation in den realen Raum geschieht mit einer Integration über den irreduziblen Teil der zweidimensionalen Brillouinzone (2DBZ)

$$G_{LL'}^{ii'}(E) = \frac{1}{A_{2\text{DBZ}}} \int_{2\text{DBZ}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{x}_{\nu} - \mathbf{x}_{\nu'})} G_{LL'}^{ii'}(\mathbf{k}_{\parallel}; E) d^2 k_{\parallel}. \quad (3.51)$$

Details der Symmetrieoperationen in der 2DBZ sind in Ref. [56] aufgeführt.

Hauptlagenmethode - N skalierender Algorithmus

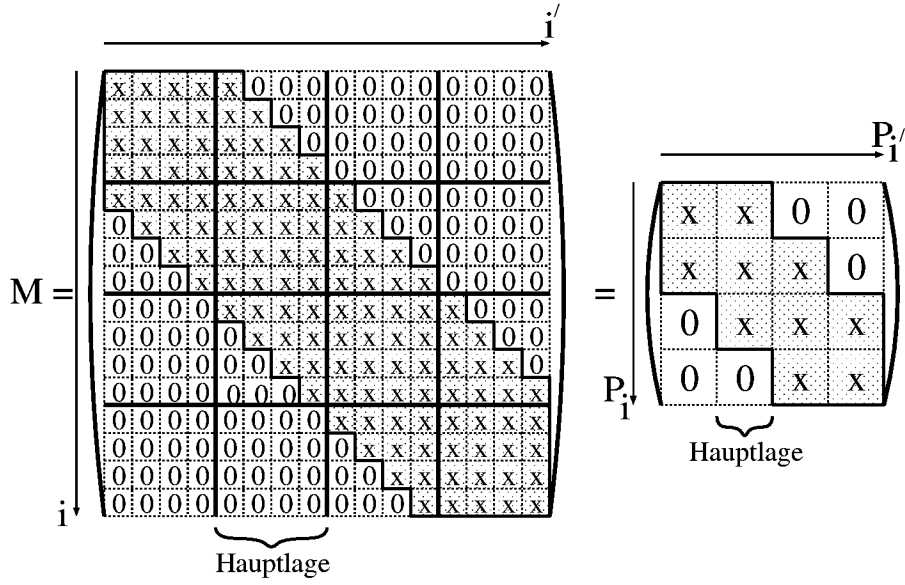
In der zweidimensionalen Geometrie und mit dem Tight-Binding KKR Formalismus kann eine Hauptlagenmethode formuliert werden, bei der der Rechenzeitaufwand linear mit der Zahl der nicht-äquivalenten Atomen ansteigt. Dieses ist im Vergleich zu der gewöhnlichen N^3 Skalierung ein enormer Vorteil, der auch die Behandlung von sehr großen Schichtsystemen erlaubt. So werden in dieser Arbeit Leitwerte bei $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ in Systemen mit über 300 nicht-identischen Atomen vorgestellt. Allerdings konnten dafür nicht alle Potentiale selbstkonsistent berechnet werden, sondern die Mehrzahl von ihnen wurde in der *frozen potential* Näherung als Bulk-artige Potentiale angenommen.

Da durch die Transformation auf das repulsive Referenzsystem die strukturelle Green-Funktion G^r so schnell abfällt, dass die Reichweite nur einige benachbarte Atome einschließt, koppeln nur wenige (typischerweise etwa 2–12) Atome bzw. Monolagen miteinander. Wird die inverse Matrix des Streupfadoperators betrachtet

$$M = \Delta\tau^{-1} = (\Delta t)^{-1} - G^r, \quad (3.52)$$

so bedeutet das, dass nur die Matrixelemente in der Nähe der Hauptdiagonalen ungleich Null sind. Andererseits wird in dem selbstkonsistenten Iterationsprozess für die Elektrodendichte (3.9) nur die Diagonalelemente ($i = i'$) des Streupfadoperators $\Delta\tau_{LL'}^{ii'}$ benötigt.

Da es sehr effektive und mit der Matrixgröße linear skalierende Algorithmen für eine Tridiagonalmatrix gibt, wird hier das Konzept der Hauptlagen⁶ eingeführt [51, 57]. Die



Abbildungung 3.2: Schematische Darstellung der Matrix $M = \Delta\tau^{-1}$ für 16 nicht-äquivalente Atome und 4 Atomen pro Hauptlage. Rechts ist M dargestellt in der Hauptlagenindizierung P_i . Ein x bedeutet, dass das entsprechende Matrixelement ungleich Null ist.

Grundidee ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Aus der Abbildung erkennt man, dass durch die Zusammenfassung mehrerer Monolagen bzw. Atomindizes zu einer Hauptlagenschicht P_i die Matrix M auf Tridiagonalgestalt gebracht werden kann. Der Rechenaufwand, um die Diagonalelemente einer zu invertierenden Tridiagonalmatrix zu berechnen, steigt linear mit der Matrixgröße an. Da diese Diagonalisierung in dem Selbstkonsistenzzyklus die meiste Zeit in Anspruch nimmt, steigt die gesamte Rechenzeit linear mit der Systemgröße bzw. mit der Anzahl der Hauptlagen an, d.h. man erhält einen $\mathcal{O}(N)$ skalierenden Algorithmus.

Halbraumgeometrie und Oberflächen Green-Funktion

In der zweidimensionalen Geometrie lassen sich dünne Schichten, die in einigen Monolagen Vakuum eingebettet sind (Film oder *Slab* Geometrie) berechnen [51, 57], aber auch Schichtsysteme zwischen zwei halbumendlichen Bulk “Elektroden”. Da in dieser Arbeit der Leitwert berechnet werden soll, wird ein in mindestens einer Richtung unendliches System mit einem quasi-kontinuierlichen Energieeigenwertspektrum benötigt. Daher wird in diesem Abschnitt nur auf das System mit dem halbumendlichen Kristall eingegangen. Es wird gezeigt, wie mit Hilfe der Dezimationstechnik im Realraum die Oberflächen Green-Funktion des Halbkristalls bestimmt wird.

Das hier betrachtete System soll aus zwei halbumendlichen Kristallen L und R sowie einem Grenzflächenbereich I dazwischen bestehen. Die Aufgabe besteht darin, eine unend-

⁶Englisch: *Principal layers*

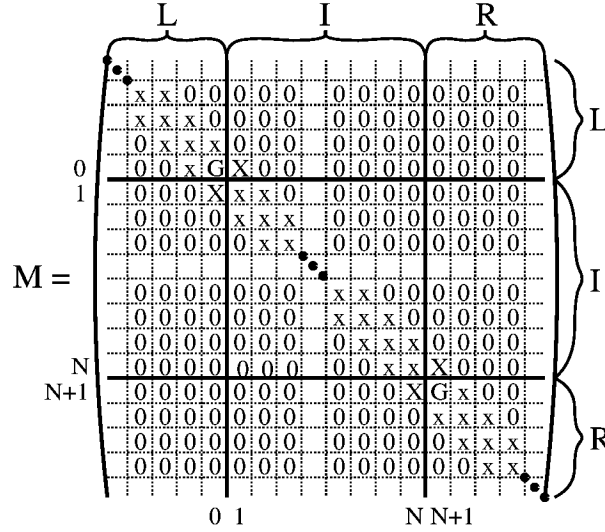


Abbildung 3.3: Schematische Zeichnung der Matrix M in der Hauptlagenindizierung (P_L) bei der Halbraumgeometrie. Ein x bedeutet ein Matrixelement ungleich Null. Die Kopplung des Grenzflächenbereiches I mit den beiden Halbräumen L und R geschieht über die Matrixelemente mit einem großen X . Das Matrixelement G wird Oberflächen Green-Funktion des Halbraumes bezeichnet. Die M Matrix hat abzählbar unendlich viele Eintragungen.

liche Matrix M zu invertieren. Details zu der Berechnung und den Algorithmen lassen sich in den Doktorarbeiten von Wildberger [51] und Bellini [57] finden. Hier wird kurz die Idee vorgestellt.

Da M aufgrund der Hauptlagenformulierung eine Tridiagonalgestalt besitzt (womit auch vorausgesetzt ist, dass die Hauptlagengröße so gewählt sein muss, dass M auch in den beiden Halbkristallen eine Tridiagonalgestalt aufweist), wechselwirkt der Grenzflächenbereich nur mit der ersten Hauptlage in den Halbkristallen. Dies ist in Abbildung 3.3 schematisch dargestellt. Die Kopplungen des Grenzflächenbereiches I mit den beiden Halbräumen L und R geschehen über die, mit einem großen X gekennzeichneten, Matrixelemente, die nur Einträge der strukturellen Green-Funktion des Referenzsystems enthalten (siehe Gleichung (3.52)). Diese Elemente koppeln ebenfalls nur mit der ersten Hauptlage des Halbkristalls, markiert mit einem großen G . Dieses Matrixelement wird in der Literatur [58] Oberflächen Green-Funktion genannt. Sie wird hier mit Hilfe der Dezimationstechnik im Realraum berechnet. Die Idee der Dezimation besteht darin, jeweils zwei benachbarte Lagen zu einer neuen Lage zusammenzufassen, da es aufgrund der Hauptlagenindizierung nur Nächste-Lagen Kopplungen gibt. Dadurch erhöht sich der gegenseitige Abstand der Lagen, und die Kopplungen untereinander nehmen ab. Im nächsten Iterationsschritt werden wieder zwei größere Lagen zu einer neuen Lage zusammengefasst usw., d.h. die Zahl der Lagen wird *dezimiert*. Mit dieser Technik wird die Kopplung sehr schnell reduziert, so dass typischerweise nur 6–7 Iterationsschritte [51] notwendig sind. Somit werden die

Eigenschaften des Halbkristalls nur durch das Matrixelement G an der Oberfläche, d.h. durch die Oberflächen Green-Funktion, beschrieben.

In der Halbraumgeometrie gibt es noch eine Besonderheit beim Iterationsprozess. Da die Fermienergie durch die beiden halbusendlichen Bulk Systeme vorgegeben ist, muss auf eine andere Art und Weise Ladungsneutralität erreicht werden. Da nun die Fermienergie nicht mehr variiert werden kann, werden die Bänder relativ dazu verschoben. Dies wird erreicht, indem vor der Berechnung des elektrostatischen Potentials eine der Ladungsneutralität entsprechende Ladung zu der vorhandenen Ladung in die ersten Monolage beider Halbräume addiert wird. Dadurch verschieben sich die Zustände in der Grenzflächenregion nach oben bzw. nach unten, und es werden Elektronen aus bzw. in den Grenzflächenbereich geschoben. Da in diesem Fall nicht mehr die Elektronenzahl, sondern die Fermienergie E_F konstant bleibt, muss das Energiefunktional $E[n]$ nach dem chemischen Potential Lagrange transformiert werden [59]. Dieses (großkanonische) Energiefunktional

$$\tilde{E}[n] = E[n] - E_F \left[\int n(\mathbf{r}) d^3r - N \right] \quad (3.53)$$

zeigt dann wieder die gewünschte Extremaleigenschaft.

Kapitel 4

Ballistischer Leitwert

Da der ballistische Transport das zentrale Thema dieser Arbeit ist, werden in diesem Kapitel die charakteristischen Eigenschaften des ballistischen Transports diskutiert. Es wird der Leitwert im Landauer-Büttiker Formalismus abgeleitet und wichtige Unterschiede zum diffusiven Transport herausgearbeitet. Anschließend wird gezeigt, wie der Leitwert mit Hilfe der linearen Antwort Theorie aus der Einteilchen Green-Funktion berechnet werden kann. Dieser Zugang wurde in dieser Arbeit verwendet, um mit Hilfe der im KKR Formalismus berechneten Green-Funktion den Leitwert zu ermitteln. Im letzten Abschnitt des Kapitels wird die Implementierung in das KKR Programm und Besonderheiten der betrachteten zweidimensionalen Geometrie diskutiert.

4.1 Einleitung

Wird eine elektrische Spannung U bzw. ein elektrisches Feld \mathbf{E} an einen Kristall angelegt, so fließt als Antwort des Systems ein bestimmter Strom I . Im Folgenden wird nur der Spezialfall betrachtet, dass zwischen beiden Größen eine lineare Abhängigkeit besteht (Ohmsches Gesetz). Der Proportionalitätsfaktor wird Leitwert¹ G genannt

$$I = GU. \tag{4.1}$$

Es wird das elektrische Feld als eine kleine äußere Störung betrachtet, die den Strom hervorruft. Dabei wird oft angenommen, dass das elektrische Feld homogen über dem (makroskopischen) Kristall verteilt ist. Dies ist aber im mikroskopischen Bild nicht mehr der Fall, da sich elektrische Dipolfelder [60] um die Streuzentren aufbauen. Anschaulich können die Dipolfelder verstanden werden, wenn man sich beispielsweise eine Tunnelbarriere als sehr viele, nebeneinander angeordnete Streuzentren vorstellt. In diesem Fall fällt die Spannung, ähnlich wie bei einem einzelnen Streuzentrum, hauptsächlich über der Tunnelbarriere ab [61]. Daher kann das elektrische Feld im mikroskopischen Bild nicht als homogen über dem gesamten Kristall verteilt angenommen werden.

¹Englisch: *Conductance*

Alternativ dazu kann ein konstanter Strom I an zwei Grenzflächen des Kristalls aufrecht gehalten werden. Dann stellt sich innerhalb des Kristalls eine Gegenspannung U aufgrund der Dipolfelder ein, die größer wird, je mehr Störstellen vorhanden sind, d.h. je größer der Widerstand R ist

$$U = RI. \quad (4.2)$$

Den Kehrwert des Leitwertes G wird elektrischer Widerstand² $R = 1/G$ genannt. Hierbei ist der elektrische Strom die äußere Störung, und die Spannung wird als Antwort darauf betrachtet. Diese Sichtweise ist auch bei der Interpretation des Stromtransport in ungeordneten Systemen sehr hilfreich [62], da hier nicht mehr davon ausgegangen werden kann, dass das äußere, elektrische Feld homogen im Kristall ist.

Bei Raumtemperatur und makroskopischen Abständen erfolgt der Stromtransport diffusiv. Dabei werden die Elektronen elastisch und phaseninkohärent an vielen statistisch verteilten Störstellen und Defekten sowie inelastisch an Phononen gestreut. Die Elektron-Elektron Streuung wird nur für tiefe Temperaturen bedeutsam. Somit stellt sich ein Gleichgewicht zwischen der Energieaufnahme durch das elektrische Feld und der Energieabgabe durch inelastische Phononenstöße oder durch Rückklappprozesse ein. So driftet das Elektron mit einer mittleren Geschwindigkeit (Driftgeschwindigkeit) durch den Kristall. Die Strecke zwischen zwei Stößen wird mittlere freie Weglänge genannt. Die in Wärme umgewandelte elektrische Energie wird als Widerstand gemessen.

Beim diffusiven Transport hängen die Proportionalitätsfaktoren G und R stark von dem Material, von den Abmaßen des Kristalls, von der Temperatur und weiteren Materialeigenschaften ab. Die Probengeometrie kann mit Hilfe der Leitfähigkeit³ σ

$$G = \frac{A\sigma}{l} \quad (4.3)$$

bzw. des spezifischen Widerstandes⁴ $\rho = 1/\sigma$ berücksichtigt werden

$$R = \frac{l\rho}{A}, \quad (4.4)$$

wobei A die Querschnittsfläche und l die Länge der Probe ist.

Wird die Temperatur erniedrigt, so werden die Elektron-Phonon-Stöße reduziert und die mittlere freie Weglänge wird größer. Bei Probenabmaßen, die viel kleiner als die mittlere freie Weglänge sind, ist der Stromtransport elastisch. Dabei werden die inelastischen Stöße vernachlässigbar. Die Elektronen werden nur noch an Gitterfehlern oder Störstellen elastisch gestoßen. Hierbei wurden sehr interessante Phänomene entdeckt, wie zum Beispiel die universelle Leitwertfluktuation⁵: ein reproduzierbares und zeitlich konstantes "Rauschen" des Leitwertes [63, 64], das durch Interferenz der in der Probe vorhandenen kohärenten Streuzentren, ähnlich dem Laser Speckle Muster [38], entsteht. In ungeordneten Systemen und in Kristallen mit vielen statistisch verteilten Störstellen wird die

²Englisch: *Resistance*

³Englisch: *Conductivity*

⁴Englisch: *Resistivity*

⁵Englisch: *Universal conductance fluctuation*

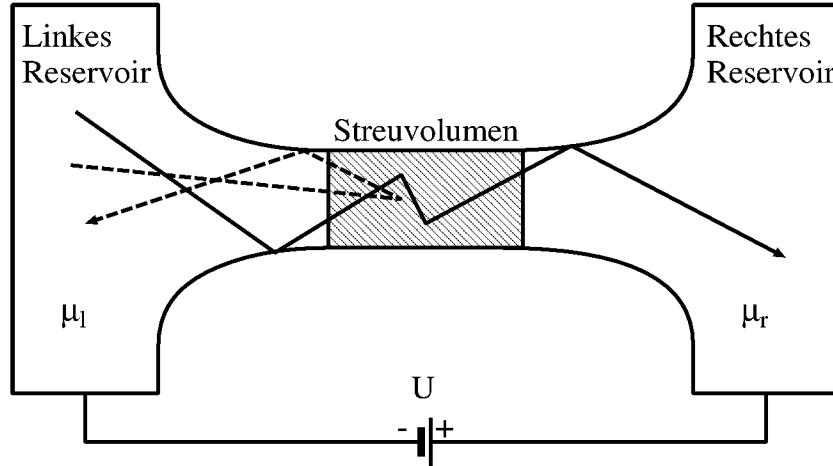


Abbildung 4.1: Modell des ballistischen Transports im Landauer-Büttiker Formalismus. Ein ballistisches Streuvolumen verbindet zwei Elektronenreservoirs, an die eine Spannung U angelegt ist. Es sind schematisch Trajektorien eines transmittierten (durchgezogene Linie) und eines reflektierten (gestrichelte Linie) Elektrons eingezeichnet.

Streuung phaseninkohärent, d.h. die Phasenbeziehungen zwischen den einfallenden und den gestreuten Elektronen sind statistisch verteilt. Dies ist der Normalfall in ungeordneten Legierungen.

Bei sehr reinen Proben gibt es den ballistischen Transport, bei dem die Elektronen nur noch an der Probengeometrie und wenigen, einzelnen Streuzentren elastisch und phasenkohärent gestreut werden. Dieser Fall wird im Folgenden untersucht. Beim ballistischen Transport sind die quantenmechanischen Eigenschaften der Blochwellen, wie z.B. die Symmetrie, der \mathbf{k} Vektor und die relative Phase der Wellenfunktionen entscheidend und viel wichtiger als beim diffusiven Stromtransport.

4.2 Landauer-Büttiker Formalismus

In diesem Abschnitt wird der ballistische Leitwert im Formalismus von Landauer und Büttiker erläutert [60, 65–68]. Dieser kann sehr anschaulich im Rahmen der Streutheorie durch Transmissionswahrscheinlichkeiten erklärt werden. Anschließend werden noch einige Eigenschaften des Formalismus diskutiert. Das betrachtete System ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Es besteht aus zwei Elektronenreservoirs, die über einen “eindimensionalen” Kristall mit einem Streuvolumen miteinander verbunden sind und an denen eine äußere “nicht zu hohe” Spannung U angelegt ist. Die chemischen Potentiale des linken μ_l und des rechten Reservoirs $\mu_r = \mu_l - eU$ sollen durch den fließenden Strom nicht verändert werden. In den Reservoirs erfahren die Elektronen phaseninkohärente und inelastische Streuungen, wohingegen der Transport durch das Streuvolumen ballistisch erfolgt. Durch die Einnengung des Kristalls auf quasi eine Dimension sind die erlaubten Zustände diskret (analog

zum Potentialtopf oder zum harmonischen Oszillator). Deshalb stehen auch nicht beliebig viele Stromkanäle zur Verfügung, sondern nur eine endliche Anzahl, die je nach Geometrie abgezählt werden. Bei einer vernachlässigbaren Temperaturverschmierung der Fermi-Dirac Verteilung sind alle Zustände in den Reservoirs bis zum chemischen Potential besetzt. Hat das linke Reservoir ein höheres chemisches Potential als das rechte ($\mu_l > \mu_r$), so können Elektronen in den Zuständen zwischen μ_r und μ_l vom linken zum rechten Reservoir fließen. Zunächst wird der einfache Fall betrachtet, dass beide Reservoirs über einen perfekten Kristall ohne Streuzentren verbunden sind und dass in dem Kristall nur der unterste Zustand besetzt ist, d.h. nur ein Stromkanal zur Verfügung steht. Das quantenmechanische Analogon des klassischen Stroms ist $I(E) = en(E)v_G(E)$, mit der Gruppengeschwindigkeit $v_G(E)$ und der eindimensionalen Zustandsdichte $n(E)$

$$n(E) = \frac{2}{2\pi} \frac{dk}{dE} = \frac{1}{\pi \hbar v_G(E)}, \quad (4.5)$$

wobei die Spinartung durch den Faktor 2 berücksichtigt ist. Somit lautet der Strom

$$I = \int_{\mu_r}^{\mu_l} en(E)v_G(E) dE = \frac{e(\mu_l - \mu_r)}{\pi \hbar}. \quad (4.6)$$

Offensichtlich hängt der Strom nicht mehr von der Gruppengeschwindigkeit und der Zustandsdichte ab. Mit der angelegten Spannung $U = (\mu_l - \mu_r)/e$ und der Gleichung (4.1) wird der Leitwert bestimmt

$$G_0 = \frac{I}{U} = 2 \frac{e^2}{h}. \quad (4.7)$$

Die Konstante $G_0 = 2e^2/h$ ist unabhängig vom Material und wird daher auch universelles Leitwertquant⁶ genannt. Sein Wert beträgt

$$G_0 = 77.4810 \mu S = \frac{1}{12.9064 \text{ k}\Omega} \quad (4.8)$$

bzw. im spinabhängigen Fall pro Spinrichtung

$$\frac{1}{2}G_0 = \frac{e^2}{h} = 38.7405 \mu S = \frac{1}{25.8128 \text{ k}\Omega}. \quad (4.9)$$

Wird nun ein Streuzentrum in den eindimensionalen Kristall eingefügt, so werden die Elektronen dort mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit $R = |r|^2$ reflektiert bzw. mit $T = 1 - R = |t|^2$ transmittiert. Die Transmissionswahrscheinlichkeiten lassen sich für einige Fälle analytisch lösen, wie für eine Tunnelbarriere in Kapitel 5, oder müssen mit mikroskopischen Verfahren numerisch gelöst werden, wie mit der KKR Green-Funktions-Methode in Kapitel 6. Wird noch der allgemeine Fall zugelassen, dass N Zustände in einem quasi-eindimensionalen Kristall besetzt sind, d.h. mehrere Stromkanäle zur Verfügung stehen,

⁶Englisch: *Conductance quantum*

so müssen die Transmissionswahrscheinlichkeiten zwischen allen diesen Zuständen $T_{nn'} = |t_{nn'}|^2$ berücksichtigt werden. Es wird angenommen, dass die Elektronen in den verschiedenen Stromkanälen den ballistischen Leiter unkorreliert durchqueren, obwohl Elektron-Elektron Wechselwirkungen im Kristall vorhanden sein können [61]. Das bedeutet anschaulich, dass die Stromdichte sehr klein ist, so dass sich die Elektronen nicht gegenseitig spüren. Dies hat zur Folge, dass die Transmissionswahrscheinlichkeiten unabhängig voneinander sind. Somit werden die Transmissionswahrscheinlichkeiten und nicht die Amplituden summiert. Es ergibt sich die Landauer-Büttiker Formel für mehrere Stromkanäle [67] (für spinentartete Systeme)

$$G = 2 \frac{e^2}{h} \sum_{n,n'=1}^N T_{nn'}. \quad (4.10)$$

Stromkanäle

Im Landauer-Büttiker Formalismus (4.10) werden die Transmissionswahrscheinlichkeiten zwischen allen vorhandenen Stromkanälen abgezählt. In diesem Abschnitt soll anhand verschiedener Systeme verdeutlicht werden, wodurch die Stromkanäle bestimmt sind.

In dem obigen Abschnitt werden die Stromkanäle aufgrund der lateralen Einengung senkrecht zur Stromrichtung bestimmt. Ist die Einengung etwa in der Größenordnung der Fermiwellenlänge, so werden die Niveaus aufgespalten [69]. Qualitativ kann dies durch die diskreten Energieniveaus im Potentialtopf oder in einem parabolischen Potential (harmonischer Oszillator) beschrieben werden. Weil nur Elektronen in den Zuständen an der Fermienergie E_F (für kleine Spannungen und niedrigen Temperaturen) zum Stromtransport beitragen, ist jeder besetzte Zustand an E_F ein spinentarteter Stromkanal und trägt im Falle eines idealen Leiters $T = 1$ jeweils mit $2e^2/h$ zum Leitwert bei.

Experimentell wurde ein quantisierter Leitwert zuerst in einem eingeschnürten zweidimensionalen Elektronengas (2DEG) beobachtet [70, 71]. In einem 2DEG kann eine sehr große mittlere freie Weglänge erreicht werden. Da die Fermiwellenlänge etwa 100 mal größer als in einem Metall ist, hat die Einschnürung eine mesoskopische Breite. In den Experimenten [70, 71] wird die Einschnürung mit demselben Prinzip wie beim Feld-Effekt-Transistor erzeugt: durch negativ geladene Gate Elektroden werden die Elektronen unterhalb der Elektroden aus dem 2DEG herausgedrängt. Da die Aufspaltung der Energieniveaus sehr klein ist, kann die Quantisierung nur bei extrem niedrigen Temperaturen ($T < 1K$) beobachtet werden.

Ein anderer Fall liegt vor, wenn der Leitwert von dünnen, metallischen Drähten⁷, Kohlenstoff-Nanoröhrchen⁸ oder atomaren Punktkontakten betrachtet wird. Da in diesen Materialien die Fermiwellenlänge etwa in derselben Größenordnung wie der Atomabstand liegt, kann eine Quantisierung nur bei atomaren Durchmessern beobachtet werden. Dabei werden die Stromkanäle ebenfalls von der Anzahl der Zustände an der Fermienergie bestimmt, wobei sie mit größerer Querschnittsfläche ansteigen. Die Aufspaltung der Ener-

⁷Englisch: *Nanowires*

⁸Englisch: *Carbon nanotubes*

gieniveaus liegt in der Größenordnung der atomaren Niveauabstände, weshalb die Quantisierung des Leitwerts auch bei Raumtemperatur nachgewiesen werden kann (z.B. [72]).

Wird die Querschnittsfläche der Drähte vergrößert, so steigt auch der Leitwert an, da mehr und mehr Stromkanäle für den Stromtransport zur Verfügung stehen. Für große Durchmesser ist eine Quantisierung nicht mehr beobachtbar, und die Aufspaltung der Energieniveaus wird vernachlässigbar. Die in dieser Arbeit untersuchten Geometrien besitzen eine zweidimensionale Translationssymmetrie in der Schichtebene senkrecht zur Stromrichtung, wodurch die Querschnittsfläche und der Leitwert formal unendlich werden, bzw. bei großen Querschnitten linear mit der Fläche A ansteigen. Anstelle von diskreten Energieniveaus liegen Bänder vor, die über dem reziproken Vektor in der Schichtebene \mathbf{k}_{\parallel} und dem Bandindex ν abgezählt werden. Die zweidimensionale Translationssymmetrie wird durch eine Fouriertransformation in der Schichtebene berücksichtigt. Der Leitwert wird im reziproken Raum berechnet und auch oft in Abhängigkeit des \mathbf{k}_{\parallel} Vektors in der zweidimensionalen Brillouinzone (2DBZ) dargestellt. In dieser Geometrie werden die Stromkanäle durch die Bänder ν und den \mathbf{k}_{\parallel} Vektoren an der Fermienergie für jede Spinrichtung σ bestimmt. Um den, auf die Fläche der zweidimensionalen Einheitszelle A_{WS} normierten, gesamten Leitwert zu erhalten, werden die Transmissionswahrscheinlichkeiten über die 2DBZ integriert. Die Landauer-Büttiker Formel (4.10) lautet im spinabhängigen Fall (auf A_{WS} normiert)

$$G^{\text{WS}} = \frac{e^2}{h} \sum_{\nu\nu'\sigma} \frac{1}{A_{2\text{DBZ}}} \int_{2\text{DBZ}} T_{\nu\nu'}^{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel}) d^2k_{\parallel}, \quad (4.11)$$

wobei die $A_{2\text{DBZ}}$ die Fläche der 2DBZ ist. Anschließend kann durch Multiplikation mit A/A_{WS} der Leitwert eines Kristalls mit der Querschnittsfläche A berechnet werden.

Leitwert eines idealen Leiters

Die Formel (4.7) beschreibt, dass ein idealer Leiter ($T = 1$) mit einem Stromkanal einen endlichen Leitwert bzw. einen nichtverschwindenden Widerstand besitzt

$$R_0 = \frac{h}{2e^2} = 12.9064 \text{ k}\Omega. \quad (4.12)$$

Dieser Widerstand wird *Spreading resistance* [68] oder Kontakt-Widerstand genannt. Bei N idealen Stromkanälen skaliert der Kontaktwiderstand mit $1/N$ (4.10). Da er nicht von dem Streuvolumen bzw. der Länge des Leiters abhängt, muss er von der Grenzfläche hervorgerufen werden, genauer von den Grenzflächen zwischen den beiden Reservoirs und dem ballistischen Leiter. Dieser stellt für den Stromfluss aufgrund der geringen Anzahl von Stromkanälen eine Verengung oder Aufspreizung⁹ des Stromflusses dar, wodurch Elektronen teilweise an den Grenzflächen reflektiert werden [68]. G_0 (4.7) kann auch als maximaler Leitwert eines idealen Stromkanals interpretiert werden.

Die Landauer-Büttiker Formel (4.10) beschreibt eine 2-Punkt-Messung¹⁰, die daher auch den Kontakt zwischen dem ballistischen Leiter und dem Reservoir berücksichtigt [68].

⁹Englisch: *Spreading*

¹⁰Englisch: *Two-probe-measurement*

Dahingegen beschreibt die ursprüngliche Formel von Landauer [60] eine 4-Punkt-Messung mit zwei zusätzlichen Reservoirs, die das chemische Potential in dem ballistischen Leiter messen. In diesem Fall lautet der Leitwert für einen Stromkanal (mit Spinentartung) [60]

$$G^{4P} = 2 \frac{e^2}{h} \frac{T}{R}, \quad (4.13)$$

wobei R die Reflektionswahrscheinlichkeit ist. Bei einer 4-Punkt-Messung geht der Leitwert eines idealen Leiters ($T \rightarrow 1$ und $R \rightarrow 0$) tatsächlich gegen unendlich, da der Kontaktwiderstand an dem Strom-Reservoir nicht berücksichtigt wird. Damit lässt sich der Kontaktwiderstand R^S an beiden Grenzflächen als ein zusätzlicher in Serie geschalteter Widerstand der 4-Punkt-Messung berechnen

$$\frac{1}{G^{2P}} = R^S + \frac{1}{G^{4P}} + R^S, \quad (4.14)$$

wobei G^{2P} die 2-Punkt Landauer-Büttiker Formel (4.10) ist, die den Kontaktwiderstand R^S enthält. Mit $R + T = 1$ ergibt sich

$$R^S = \frac{1}{2} \frac{h}{2e^2}. \quad (4.15)$$

Da stets zwei Grenzflächen vorhanden sind, ist dies das erwartete Ergebnis nach (4.12).

Energiedissipation beim ballistischen Transport

Die Landauer-Büttiker Theorie des ballistischen Transports gibt den elektrischen Leitwert G bzw. Widerstand $R = 1/G$ eines ballistischen Leiters an. Allerdings bedeutet ein elektrischer Widerstand, dass die Elektronen die durch das angelegte elektrische Feld gewonnene kinetische Energie wieder durch Phononanregung an den Kristall abgeben müssen. Daher stellt sich die Frage, wo die Elektronen in einem rein ballistischen Leiter, d.h. ohne inelastische Stöße, Energie abgeben können. Dies geschieht in den beiden großen Elektronenreservoirs, wo die Elektronen nicht nur ihre Phasenbeziehung untereinander verlieren, sondern auch inelastische Stöße erfahren. So werden sie auf das entsprechende chemische Potential des Reservoirs "thermalisiert". Daher werden die Reservoirs auch das elektrische Analogon des schwarzen Strahlers genannt [61]. Im elektrischen Reservoir werden die Elektronen gemäß der Fermi-Dirac Statistik thermalisiert, wohingegen beim schwarzen Strahler (Bosonen) die Bose-Einstein Verteilung gilt. Ein beeindruckendes Experiment von Frank und Mitarbeitern [72] belegt diese Behauptung. In dem Experiment wurde an etwa $4\mu\text{m}$ langen Kohlenstoff-Nanoröhrchen ein gequantelter Strom bzw. Leitwert gemessen. Bei hohen Spannungen von 6V konnte durch die etwa 15nm dicken Nanoröhrchen eine stabile Stromdichte von etwa 10^7 Acm^{-2} erreicht werden (zum Vergleich: Bei Supraleitern wird eine Stromdichte von etwa 10^5 Acm^{-2} erreicht). Die dabei in Wärme umgewandelte elektrische Leistung betrug 3mW. Würde diese Leistung in den Nanoröhrchen in Wärme umgewandelt werden, so zeigt eine Abschätzung [72], würden sie sich auf etwa 20 000K aufheizen.

Andererseits fangen Nanoröhrchen bei etwa 700°C zu brennen an. Da diese hohe Stromdichte stabil aufrecht gehalten werden kann, ohne das Nanoröhrchen zu zerstören, muss die Energie der Elektronen vollständig oder zumindest zum größten Teil in den Reservoirs in Wärme umgewandelt werden und der Stromtransport in den Nanoröhrchen ballistisch, d.h. ohne Energieabgabe, erfolgen.

Bias-Spannung

Das Leitungsband eines idealen Kristalls weist nach Landauer-Büttiker außer dem Kontaktwiderstand keinen Widerstand auf, da alle Kanäle eine Transmission von 1 haben. Für Elektronen im Leitungsband eines idealen Kristalls wurde aber gezeigt [73], dass ohne inelastische Streuung die Elektronen lediglich sogenannte Bloch-Oszillationen im Orts- und Impulsraum ausführen und somit keinen Strom transportieren. Bei einem angelegten elektrischen Feld \mathbf{E} ändert sich der \mathbf{k} Vektor der Blochwelle linear mit der Zeit $\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(t_0) + e\mathbf{E}t$. Das bedeutet, dass das Blochelektron vom Leitungsbandminimum in Richtung Brillouin-zonenrand wandert und dort wieder zum anderen Rand “zurückgefaltet” wird. Da $E(\mathbf{k})$ aufgrund der Zeitinversionssymmetrie symmetrisch zum Ursprung der Brillouinzone ist, ist die Gruppengeschwindigkeit antisymmetrisch und der Strom führt daher lediglich Oszillationen aus. Dieser Widerspruch kann mit einer geringen, angelegten Spannung erklärt werden, bei der das Elektron nur eine sehr kleine Energie aufnimmt und somit im Leitungsbandminimum verbleibt. Anders ausgedrückt, der \mathbf{k} Vektor der Blochwelle bleibt für hinreichend kleine elektrische Felder und endliche Zeiten konstant

$$\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(t_0) + \frac{e\mathbf{E}}{\hbar}t \quad \mathbf{E} \ll \frac{\hbar}{et} \mathbf{k}(t_0) \quad \mathbf{k}(t_0). \quad (4.16)$$

Damit ist an einem Beispiel veranschaulicht worden, dass die angelegte Spannung beim Landauer-Büttiker Formalismus nicht beliebig hoch sein darf, damit keine nicht-linearen Effekte entstehen. Die im nächsten Abschnitt vorgestellte lineare Antwort Theorie geht sogar von einer infinitesimal kleinen Spannung aus.

4.3 Lineare Antwort Theorie des Leitwerts

In diesem Abschnitt wird der ballistische Leitwert in der linearen Antwort Theorie berechnet. Die Herleitung folgt der Arbeit von Baranger und Stone [38]. Da in der KKR-Methode die Green-Funktion bestimmt wird, wird ein Green-Funktions Ausdruck des Leitwertes angegeben. Mit diesem Formalismus wurden die Leitwerte in dieser Arbeit ermittelt.

Das betrachtete System ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Es besteht aus einem Streuzentrum, an dem ideale, unendlich lange, gerade Elektroden angeschlossen sind. Im Folgenden wird vorausgesetzt, dass die Berechnung des Stroms in den Elektroden im asymptotischen Bereich erfolgt, d.h. in dem Bereich, wo das elektrische Potential einen konstanten Wert angenommen hat und alle evaneszenten Wellen bereits abgeklungen sind. Im Gegensatz zu Ref. [38] wird hier der Spezialfall betrachtet, dass kein äußeres Magnetfeld vorhanden ist und nur zwei Elektroden an das Streuvolumen angeschlossen sind.

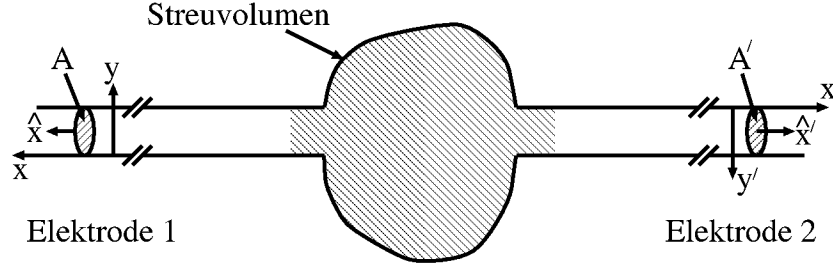


Abbildung 4.2: Modell des ballistischen Transports in der linearen Antwort Theorie von Baranger und Stone [38]. An das Streuvolumen sind zwei unendlich lange, gerade und ideale Elektroden angeschlossen. In den Elektroden wird ein Koordinatensystem wie dargestellt definiert.

In dem Beweis wird der Erwartungswert des Stromdichteoperators $\tilde{\mathbf{J}}$ in der linearen Antwort Theorie aufgrund einer äußeren Störung in Form eines elektrischen Feldes berechnet. Da hier die lineare Antwort gesucht wird, wird die Stromdichte für den Grenzfalle berechnet, dass das elektrische Feld bzw. die angelegte Spannung gegen Null geht. Mit diesem Grenzwert des Stromdichteerwartungswerts wird der nicht-lokale Leitfähigkeitstensor $\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ und die Leitwertkoeffizienten $G_{nn'}$ in der Darstellung des vollständigen, orthonormalen Basissatzes des ungestörten Systems angegeben. Da dieses für praktische Zwecke ungeeignet ist, wird $\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ und $G_{nn'}$ durch einen Green-Funktions Ausdruck beschrieben. Weiter konnten Baranger und Stone [38] und vorher für den Fall ohne Magnetfeld Stone und Szafer [68] zeigen, dass sich der Landauer-Büttiker Formalismus aus der linearen Antwort Theorie herleiten lässt. Hier werden die wichtigsten Schritte des Beweises skizziert, eine ausführlichere Ableitung ist im Anhang A zu finden.

In der Herleitung wird die Spinentartung nicht berücksichtigt, und es werden keine atomaren Einheiten benutzt. Die Umformung auf atomare Einheiten ist am Schluss leicht ersichtlich. H_0 ist der Einteilchen-Hamiltonoperator mit einem effektiven Potential $U(\mathbf{r})$ des betrachteten Systems ohne angelegtes elektrisches Feld. Er hat einen vollständigen, orthonormalen Basissatz von Eigenzuständen $\Psi_\alpha(\mathbf{r})$ mit Eigenwerten E_α . In diesem System wird die lineare Antwort auf eine kleine Störung durch ein äußeres elektrisches, oszillierendes Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\Phi(\mathbf{r}, t)$ berechnet. Der Hamiltonoperator des gestörten Systems lautet

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})}_{H_0} + e\Phi(\mathbf{r}, t). \quad (4.17)$$

Das elektrische Potential Φ oszilliert mit einer Frequenz Ω und wird bei $t = 0$ über δ adiabatisch ausgeschaltet

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) \cos(\Omega t) e^{-\delta|t|}. \quad (4.18)$$

Es wird im Folgenden die Antwort des Stromdichteoperators $\tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{r})$ gesucht

$$\tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}e \left[n(\mathbf{r}) \frac{\mathbf{p}}{m} + \frac{\mathbf{p}}{m} n(\mathbf{r}) \right], \quad (4.19)$$

wobei m die Elektronenmasse, $n(\mathbf{r})$ der Teilchendichte- und \mathbf{p} der Impulsoperator ist. Dies ist das quantenmechanische Analogon zur klassischen Stromdichte $\mathbf{j} = en\mathbf{v} = en\mathbf{p}/m$, mit der Gruppengeschwindigkeit \mathbf{v} bzw. dem Impuls \mathbf{p} und der Elektronendichte n . Der Erwartungswert $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ des Stromdichteoperators lautet in linearer Näherung

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \underbrace{\text{Sp}[\rho_0 \mathbf{J}(\mathbf{r})]}_{\mathbf{J}_0(\mathbf{r})} + \underbrace{\text{Sp}[\rho_1(t) \mathbf{J}(\mathbf{r})]}_{\mathbf{J}_1(t, \mathbf{r})} + \dots \quad (4.20)$$

Der Stromdichteerwartungswert \mathbf{J}_0 der ungestörten Dichtematrix ρ_0 verschwindet stets aufgrund der Zeitinversionssymmetrie. Dies bedeutet physikalisch, dass ohne elektrisches Feld sich der Strom durch die Elektronenbewegung genau aufhebt, da es immer ein Elektron gibt, das sich mit derselben Geschwindigkeit in die entgegengesetzte Richtung bewegt. Erst bei einer Störung $\rho_1(t)$ durch das elektrische Feld ergibt sich eine Nettobewegung und somit einen Ladungstransport. An dieser Stelle wird der Grenzwert der Stromdichte betrachtet, dass die elektrische Störung über δ adiabatisch ausgeschaltet wird und dass die Frequenz der Störung Ω gegen Null geht

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \lim_{\Omega \rightarrow 0} \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t, \Omega, \delta). \quad (4.21)$$

Dabei ist die Reihenfolge der Grenzwerte wichtig, da sich zuerst das System auf die äußere Oszillation "einschwingen" soll, bevor die Oszillationsfrequenz reduziert wird [38, 68].

Die Stromdichte ist mit dem elektrischen Feld über den nicht-lokalen Leitfähigkeitstensor $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ verknüpft

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \int_V \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') d^3r'. \quad (4.22)$$

Diese Formel besagt, dass die Stromdichte am Ort \mathbf{r} von dem elektrischen Feld und der Leitfähigkeit im gesamten Kristall abhängt. Mit dieser Beziehung kann $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ angegeben werden (siehe Anhang A)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{e^2 \hbar^3 \pi}{4m^2} \iint f'(E_\alpha) \delta(E_\beta - E_\alpha) \\ &\quad \left(\Psi_\beta^*(\mathbf{r}) \overleftrightarrow{\nabla} \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \right) \left(\Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \overleftrightarrow{\nabla}' \Psi_\beta(\mathbf{r}') \right) d\beta d\alpha, \end{aligned} \quad (4.23)$$

wobei $\overleftrightarrow{\nabla}$ der beidseitige Ableitungsoperator

$$g \overleftrightarrow{\nabla} h = g \nabla h - h \nabla g = -h \overleftrightarrow{\nabla} g \quad (4.24)$$

und $f(E)$ die Fermi-Dirac Verteilung ist. Offensichtlich ist der Leitfähigkeitstensor symmetrisch in \mathbf{r} und \mathbf{r}'

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}', \mathbf{r}). \quad (4.25)$$

Für den Stromdichteerwartungswert $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ gilt

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.26)$$

Das bedeutet, dass der Stromdichteoperator die Stromerhaltung erfüllt. Für den nicht-lokalen Leitfähigkeitstensor ergibt sich daraus und aus der Symmetrie von σ folgende Bedingung für die Stromerhaltung

$$\vec{\nabla} \cdot \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \overleftarrow{\nabla}' = 0, \quad (4.27)$$

wobei der Pfeil angibt, auf welcher Seite die Divergenz wirkt.

Die beim ballistischen Transport wichtige Größe ist der Leitwert und nicht die Leitfähigkeit, da die spezielle Probengeometrie und Störstellenkonfiguration den Strom entscheidend beeinflussen [38]. Die Leitwertkoeffizienten G_{nm} werden definiert über den Gesamtstrom durch die Querschnittsfläche der m -ten Elektrode A_m (siehe Abbildung 4.2) und das konstante Potential im asymptotischen Bereich der n -ten Elektrode U_n

$$I_m = \int_{A_m} \mathbf{J}(\mathbf{x}_m) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m d^2 y_m = \sum_n G_{mn} U_n. \quad (4.28)$$

Die Stromdichte I_m ist positiv, wenn der Strom aus dem Streuvolumen herausfließt. Da hier nur zwei Elektroden angeschlossen sind, kann die Spannung an einer Elektrode beliebig gewählt werden: $U_1 = 0$ und $U_2 = U$

$$I_1 = G_{12}U = -I_2 = -G_{22}U. \quad (4.29)$$

Im Folgenden werden durchgängig alle Größen der Elektrode 1 ungestrichen ($A, \mathbf{r}, \hat{\mathbf{x}}, \dots$) und die der Elektrode 2 gestrichen ($A', \mathbf{r}', \hat{\mathbf{x}}', \dots$) geschrieben (siehe Abbildung 4.2). Wird der Leitfähigkeitstensor aus (4.23) in die (4.28) eingesetzt, so lautet das Nichtdiagonalelement des Leitwertkoeffizienten

$$G_{12} = -\frac{e^2 \hbar^3 \pi}{4m^2} \iint f'(E_\alpha) \delta(E_\beta - E_\alpha) \int_A \hat{\mathbf{x}} \cdot \left(\Psi_\beta^*(\mathbf{r}) \vec{\nabla} \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \right) d^2 r \int_{A'} \left(\Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \vec{\nabla}' \Psi_\beta(\mathbf{r}') \right) \cdot \hat{\mathbf{x}}' d^2 r' d\beta d\alpha. \quad (4.30)$$

Für praktische Berechnungen ist die Darstellung in der vollständigen, orthonormalen Basis der Lösungen des ungestörten Systems nicht gut geeignet, da über alle Basisfunktionen an der Fermienergie integriert werden muss. Dagegen liegt in der KKR Green-Funktions-Methode die Einteilchen Green-Funktion direkt vor und kann auch mit anderen Methoden berechnet werden. Daher wird nach [38] der Leitwert mit Hilfe der Green-Funktion ausgedrückt. Die retardierte G^+ und avancierte G^- Green-Funktion in der Spektraldarstellung (3.6) liefert folgende Identität

$$G^-(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E) = G^{+*}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E). \quad (4.31)$$

Im Anhang A wird der allgemeine Fall mit N Elektroden behandelt. Für den hier betrachteten Fall von zwei Elektroden und mit der Identität (4.31) lautet das Nichtdiagonalelement des Leitwertkoeffizienten mit der retardierten Green-Funktion

$$G_{12} = -\frac{e^2 \hbar^3}{8\pi m^2} \int_{-\infty}^{\infty} [-f'(E)] \int_A \int_{A'} G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) (\hat{\mathbf{x}} \cdot \overleftrightarrow{\nabla}) (\overleftrightarrow{\nabla}' \cdot \hat{\mathbf{x}}') G^{+*}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) d^2 r' d^2 r dE. \quad (4.32)$$

Dabei bewirkt $-f'(E)$, dass nur Zustände in der Nähe der Fermienergie zum Stromtransport beitragen. Die Halbwertsbreite von $-f'(E)$ beträgt $3.53k_B T$. Der Grenzfall $T \rightarrow 0$ liefert

$$-f'(E) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \delta(E - E_F), \quad (4.33)$$

d.h. nur Zustände an der Fermienergie tragen zum Leitwert bei. In Ref. [38] wird mit Hilfe der Streutheorie die Äquivalenz der linearen Antwort Theorie mit dem Landauer-Büttiker Formalismus bewiesen.

4.4 Implementierung in das KKR Programm

In diesem Abschnitt wird die Implementierung der Leitwertberechnung in der linearen Antwort Theorie nach Baranger und Stone [38] in die KKR-Green-Funktions-Methode erläutert [74]. Dazu muss der Ausdruck zur Berechnung des Leitwertkoeffizienten im Green-Funktions Formalismus (4.32) auf die in dieser Arbeit betrachteten Systeme (siehe Abbildung 4.3) mit einer zweidimensionalen Translationssymmetrie angepasst werden. Diese Systeme unterscheiden sich in einigen Punkten von der Geometrie bei der Herleitung des Leitwertes in der linearen Antwort Theorie [38]. Der wichtigste Unterschied ist, dass anstelle von unendlich langen, idealen Elektroden mit einer endlichen Querschnittsfläche hier die Elektroden durch zwei Halbkristalle mit einer zweidimensionalen Translationssymmetrie beschrieben werden. Die beiden Elektroden weisen somit eine unendliche Querschnittsfläche auf, weshalb der Leitwert auf die Fläche der zweidimensionalen Einheitszelle normiert wird. Dies wird ausführlicher in Abschnitt 4.4.2 diskutiert.

Die elektronische Struktur der halbunendlichen Elektroden wird durch die Oberflächen Green-Funktion beschrieben, die mit Hilfe der Dezimationstechnik für einen unendlichen Halbkristall bestimmt wird (siehe Kapitel 3.5.2). Die Potentiale hierfür werden vorher in einer Bulk¹¹ Rechnung selbstkonsistent bestimmt. Zwischen den beiden Halbkristallen, die nicht zwangsläufig identisch sein müssen, befinden sich die Potentiale der Atome, die selbstkonsistent mit den Halbraumumgebungen als Randbedingung bestimmt werden. Diese können zum Beispiel die Struktur von zwei identischen Halbkristallen so fortsetzen, dass der Leitwert von dem Bulk Kristall berechnet werden kann (siehe Anhang C). Sie können aber auch eine Tunnelbarriere enthalten (siehe Kapitel 5) oder die Grenzfläche zwischen zwei unterschiedlichen Elektroden selbstkonsistent beschreiben (siehe Kapitel 6).

¹¹Volumenkristall

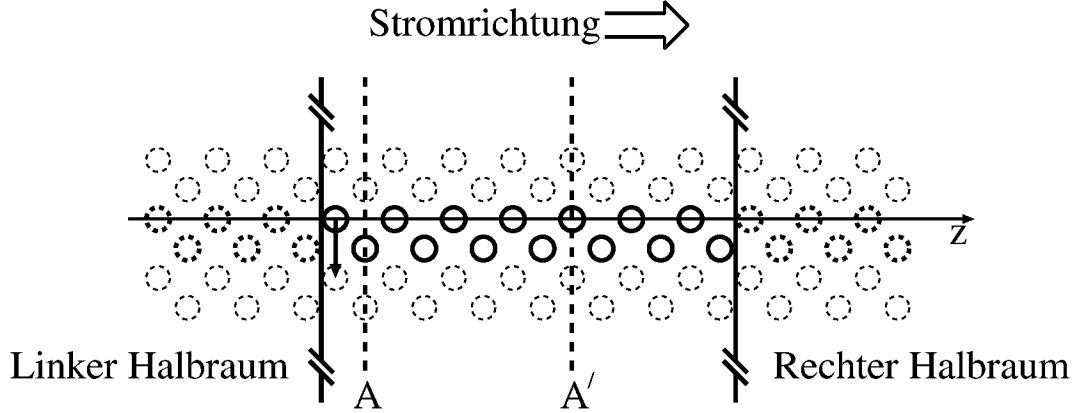


Abbildung 4.3: System bei der Berechnung des ballistischen Leitwerts im Baranger-Stone Formalismus mit Hilfe der KKR Green-Funktions-Methode. Die z Richtung (Stromrichtung) steht senkrecht auf der Schichtebene, in der eine zweidimensionale Translationssymmetrie vorhanden ist. Die äquivalenten Atome aufgrund der Translationssymmetrie sind gestrichelt gezeichnet. A und A' geben die beiden Monolagen an, durch die die Stromdichte berechnet wird.

Es wird gezeigt, wie in dieser Geometrie der Leitwertkoeffizient G_{12} nach Gleichung (4.32) berechnet wird [74]. Im Prinzip könnte auch G_{22} berechnet werden, da $G_{12} + G_{22} = 0$ (4.29) gilt. Hier wird aber die Berechnung von G_{12} vorgezogen, weil so der Einzelstreuteil der Green-Funktion nicht benötigt wird.

Weil hier der Grenzfall $T \rightarrow 0$ betrachtet wird, werden alle Gleichungen an der Fermienergie E_F ausgewertet. In den Rechnungen wird allerdings aus numerischen Gründen ein kleiner Imaginärteil der Energie verwendet (in der Größenordnung von 10^{-2}Ryd), der eine schmale lorentzartige Verschmierung der Energie und somit auch des Leitwertes hervorruft. Der Einfluss dieser Verschmierung auf den Leitwert wird in Anhang B diskutiert. Der Einfachheit halber wird die Energievariable im Folgenden weggelassen.

Die Bezeichnung der Stützvektoren (3.45) ist an die zweidimensionale Geometrie angepasst (siehe Abbildung 4.4). Es wird, wie in Gleichung (4.11) beschrieben, der Leitwert in dem hier vorliegenden zweidimensionalen System im reziproken Raum in Abhängigkeit des \mathbf{k}_{\parallel} Vektors bestimmt. Dazu wird die Green-Funktion (3.46), wie in Abschnitt 3.5.2 gezeigt, in der Schichtebene fouriertransformiert (3.51). Da für G_{12} die Green-Funktion zwischen zwei verschiedenen Monolagen benötigt wird, wird der Einzelstreubeitrag nicht gebraucht ($i \neq i'$ in (3.46)). Die Green-Funktion ohne Einzelstreubeitrag lautet in der

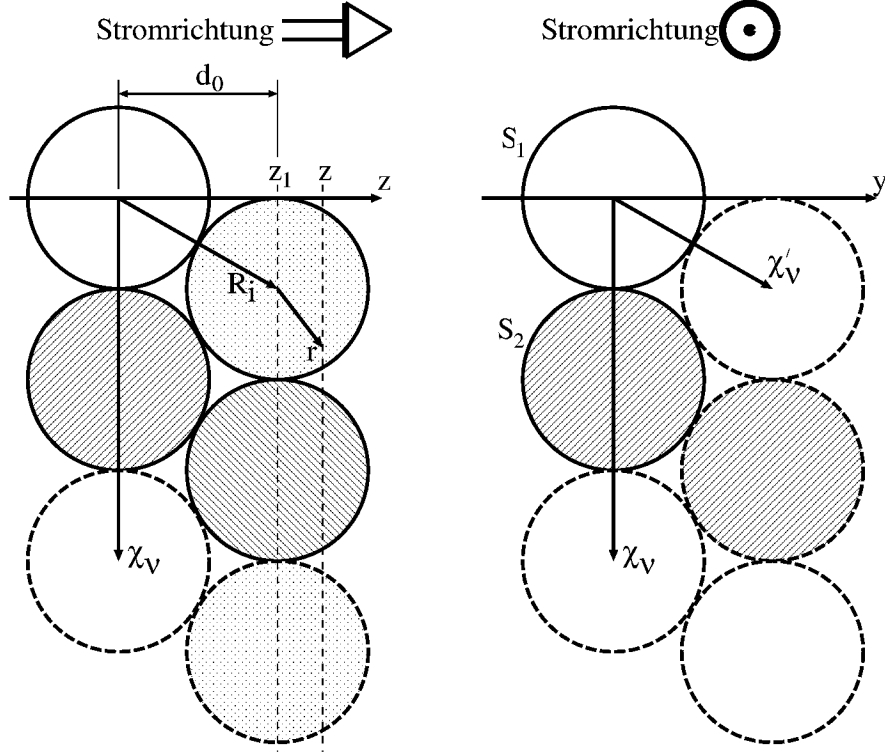


Abbildung 4.4: Geometrie bei der Berechnung des Leitwertes im KKR Formalismus in Seitenansicht (links) und Draufsicht (rechts) bezüglich der Stromrichtung. Die zweidimensionale Einheitszelle (durchgezogene Kreislinien) besteht hier aus zwei unterschiedlichen Atomen. Zur besseren Sichtbarkeit sind die ASA Kugeln nicht-überlappend eingezeichnet. Die z Richtung steht senkrecht auf der Schichtebene. d_0 ist der Monolagenabstand.

zweidimensionalen Nomenklatur (Gleichung (3.46) und (3.51))

$$\begin{aligned}
 G(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i + \boldsymbol{\chi}_\nu, \mathbf{r}' + \mathbf{R}_{i'} + \boldsymbol{\chi}_{\nu'}) &= \sum_{LL'} R_L^i(\mathbf{r}) G_{LL'}^{ii'} R_{L'}^{i'}(\mathbf{r}') \\
 &= \sum_{LL'} R_L^i(\mathbf{r}) R_{L'}^{i'}(\mathbf{r}') \frac{1}{A_{2\text{DBZ}}} \int_{A_{2\text{DBZ}}} e^{i\mathbf{k}_\parallel \cdot (\boldsymbol{\chi}_\nu - \boldsymbol{\chi}_{\nu'})} G_{LL'}^{ii'}(\mathbf{k}_\parallel) d^2 k_\parallel.
 \end{aligned}$$

Das Integral über die beiden Ebenen A und A' in Gleichung (4.32) wird geschrieben als Summe über die Flächen der zweidimensionalen Einheitszellen im betrachteten Grundgebiet (GG), das $N_{\text{GG}} \gg 1$ zweidimensionale Einheitszelle enthält. Da i.A. die Fläche der Einheitszelle aus mehreren Atomen pro Monolagen besteht, wird über die Fläche S_i aller Atome in der Monolage summiert (siehe Abbildung 4.4 rechts)

$$\int_A d^2 r = \sum_{\nu=1}^{N_{\text{GG}}} \sum_i \int_{S_i} d^2 r \quad \text{und} \quad \int_{A'} d^2 r' = \sum_{\nu'=1}^{N_{\text{GG}}} \sum_{i'} \int_{S_{i'}} d^2 r' \quad (4.34)$$

Der $\overleftrightarrow{\nabla}$ Operator wird in dieser Geometrie zu $\overleftrightarrow{\partial}_z$, da die z Richtung senkrecht auf der Schichtebene steht (siehe Abbildung 4.3). Da der Leitwert auf die Fläche der zweidimensionalen Einheitszelle normiert werden soll, wird G_{12} durch die Anzahl der zweidimensionalen Einheitszellen im Grundgebiet N_{GG} geteilt. Somit lautet die Gleichung (4.32)

$$G_{12}^{\text{WS}} = \frac{G_{12}}{N_{\text{GG}}} = -\frac{1}{N_{\text{GG}}} \frac{e^2 \hbar^3}{8\pi m^2} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{GG}}} \sum_i \int_{S_i} \sum_{\nu'=1}^{N_{\text{GG}}} \sum_{i'} \int_{S_{i'}} \sum_{LL'} R_L^i(\mathbf{r}) R_{L'}^{i'}(\mathbf{r}') \frac{1}{A_{2\text{DBZ}}} \int_{2\text{DBZ}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot (\mathbf{x}_{\nu} - \mathbf{x}_{\nu'})} G_{LL'}^{ii'}(\mathbf{k}_{\parallel}) d^2 k_{\parallel} \overleftrightarrow{\partial}_z \overleftrightarrow{\partial}_{z'} \sum_{L''L'''} R_{L''}^{i*}(\mathbf{r}) R_{L'''}^{i'*}(\mathbf{r}') \frac{1}{A_{2\text{DBZ}}} \int_{2\text{DBZ}} e^{-i\mathbf{k}'_{\parallel} \cdot (\mathbf{x}_{\nu} - \mathbf{x}_{\nu'})} G_{L''L'''}^{ii'*}(\mathbf{k}'_{\parallel}) d^2 k'_{\parallel} d^2 r d^2 r'. \quad (4.35)$$

Mit der Beziehung

$$\frac{1}{A_{2\text{DBZ}}} \sum_{\nu'=1}^{N_{\text{GG}}} e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel}) \cdot (\mathbf{x}_{\nu} - \mathbf{x}_{\nu'})} = \delta(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel}) \quad (4.36)$$

kann eine der beiden Brillouinzoneintegrationen ausgeführt werden. Weiter werden die regulären Lösungen zu Matrixelementen des Stromdichteoperators zusammengefasst

$$J_{LL'}^i = \int_{S_i} R_L^i(\mathbf{r}) \partial_z R_{L'}^{i*}(\mathbf{r}) d^2 r. \quad (4.37)$$

Damit vereinfacht sich Gleichung (4.35) zu

$$G_{12}^{\text{WS}} = -\frac{1}{N_{\text{GG}}} \frac{e^2 \hbar^3}{8\pi m^2} \sum_{\nu=1}^{N_{\text{GG}}} \sum_{ii'} \sum_{LL'} \sum_{L''L'''} \left[J_{LL''}^i J_{L'L'''}^{i'} - J_{LL''}^i J_{L''L'}^{i'*} - J_{L'L'''}^{i'} J_{L''L}^{i*} + J_{L''L}^{i*} J_{L'L'''}^{i'*} \right] \frac{1}{A_{2\text{DBZ}}} \int_{2\text{DBZ}} G_{LL'}^{ii'}(\mathbf{k}_{\parallel}) G_{L''L'''}^{ii'*}(\mathbf{k}_{\parallel}) d^2 k_{\parallel}. \quad (4.38)$$

Da kein Term mehr von ν abhängt, ergibt die entsprechende Summe N_{GG} . Der Vorfaktor wird etwas umgeschrieben, um die Einheiten zu verdeutlichen. Somit ergibt sich ein auf die Fläche der zweidimensionalen Einheitszelle A_{WS} normierter Leitwertkoeffizient G_{12}^{WS} von

$$G_{12}^{\text{WS}} = \frac{e^2}{h} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 \frac{1}{A_{2\text{DBZ}}} \int_{2\text{DBZ}} \sum_{L'L''} \sum_{ii'} A_{L'L''}^{ii'}(\mathbf{k}_{\parallel}) B_{L'L''}^{ii'*}(\mathbf{k}_{\parallel}) d^2 k_{\parallel}, \quad (4.39)$$

mit den Abkürzungen

$$A_{L'L''}^{ii'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \sum_L \left(J_{LL''}^i - J_{L''L}^{i*} \right) G_{LL''}^{i,i'}(\mathbf{k}_{\parallel}) \quad (4.40)$$

$$B_{L'L''}^{ii'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \sum_{L'''} \left(J_{L''L'}^{i'} - J_{L'L'''}^{i'*} \right) G_{L''L'}^{i,i'}(\mathbf{k}_{\parallel}). \quad (4.41)$$

4.4.1 Berechnung des Stromdichteoperators

Nun wird die Berechnung der Matrixelemente des Stromdichteoperators $J_{LL'}^i(E_F)$ diskutiert [74]. Da in den Rechnungen hier stets ASA¹² Potentiale verwendet werden, wird die Berechnung auf diesen Fall beschränkt. Es gibt zwei Möglichkeiten, die Matrixelemente zu berechnen: mittels einer Flächenintegration, bei der das Integral auf der Ebene durch die Mitte der Atome (Ebene z_1 in Abbildung 4.4) ausgewertet wird oder mittels einer Volumenintegration, bei der der Stromdichteoperator über das gesamte Atomvolumen integriert und anschließend über den Monolagenabstand gemittelt wird. Da die zweite Methode in den meisten Fällen eine bessere l -Konvergenz zeigt, wird sie zuerst vorgestellt. Alle in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse sind mit der Volumenintegration bestimmt worden. Im Folgenden wird der Atomindex i des Stromdichteoperators der Übersicht wegen weggelassen.

Berechnung über eine Volumenintegration

Bei der Berechnung des Stromdichteoperators über eine Volumenintegration wird die Stromdichte über die gesamte Monolage integriert (\tilde{J}) und anschließend über den Monolagenabstand d_0 (siehe Abbildung 4.4) gemittelt

$$J_{LL'} = \frac{1}{d_0} \tilde{J}_{LL'} \quad (4.42)$$

$$\text{mit} \quad \tilde{J}_{LL'} = \int_{V_{\text{ASA}}} R_L(\mathbf{r}) \partial_z R_{L'}^*(\mathbf{r}) d^3r. \quad (4.43)$$

Das Integrationsvolumen ist das Atomvolumen in der ASA Näherung. Der Winkelanteil des Integrals lässt sich analytisch lösen, und es bleibt lediglich ein Integral über den radialen Anteil übrig. Für das Integral wird die reguläre Lösung (3.17) benötigt

$$R_L(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$$

sowie die reellen Kugelflächenfunktionen

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) &= a_{lm} \operatorname{trg}(m\varphi) P_l^{|m|}(\cos \vartheta) \\ \text{mit} \quad a_{lm} &= \begin{cases} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} & , m = 0 \\ \sqrt{\frac{2l+1}{2\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} & , m \neq 0 \end{cases} \\ \text{und} \quad \operatorname{trg}(m\varphi) &= \begin{cases} \cos(m\varphi) & , m \geq 0 \\ \sin(|m|\varphi) & , m < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.44)$$

¹²Englisch: *Atomic Sphere Approximation*

mit den Legendre Polynomen $P_l^{|m|}(\cos \vartheta)$. Für die Ableitung der Legendre Polynome wird die Rekursionsformel benutzt [75]

$$(x^2 - 1) \frac{dP_l^{|m|}(x)}{dx} = lxP_l^{|m|}(x) - (l + m)P_{l-1}^{|m|}(x) \quad (4.45)$$

mit $P_{l-1}^{|m|}(x) = 0$, für $|m| > l - 1$.

Mit der Ableitung ∂_z in Kugelkoordinaten

$$\partial_z = \cos \vartheta \partial_r + \frac{1 - \cos^2 \vartheta}{r} \partial_{\cos \vartheta} \quad (4.46)$$

wird folgender Ausdruck für den über den Monolagenabstand integrierten Stromdichteoperator erhalten

$$\begin{aligned} \tilde{J}_{LL'} &= \frac{1}{a_{10}} C_{10,lm,l'm'} \int_0^{R_{WS}} R_l(r) \partial_r R_{l'}^*(r) dr \\ &+ \frac{a_{l'm'}}{a_{l'-1,m'}} (l' + |m'|) \delta_{l'-1,l} \delta_{m,m'} \int_0^{R_{WS}} \frac{R_l(r) R_{l'}^*(r)}{r} dr \\ &- \frac{1}{a_{10}} (1 + l') C_{10,lm,l'm'} \int_0^{R_{WS}} \frac{R_l(r) R_{l'}^*(r)}{r} dr, \end{aligned} \quad (4.47)$$

mit den Gaunt Koeffizienten $C_{LL'L''}$ (3.30).

Berechnung des Stromdichteoperators über eine Flächenintegration

Alternativ kann der Stromdichteoperator auch über eine Integration in der Ebene durch den Mittelpunkt der Atome (siehe Abbildung 4.4) bestimmt werden [74]. Der Radius der Kreisfläche ist der Wigner-Seitz Radius der ASA Potentiale. Damit wird ein kleiner Fehler gemacht, da diese Fläche nicht mit der Fläche der zweidimensionalen Einheitszelle übereinstimmen muss. Es ist folgendes Integral auszuwerten

$$J_{LL'} = \int_{A_{WS}} R_L(\mathbf{r}) \partial_z R_{L'}^*(\mathbf{r}) d^2r \quad (4.48)$$

$$= \int_{V_{ASA}} R_L(\mathbf{r}) \partial_z R_{L'}^*(\mathbf{r}) \delta(z_1 - z) d^3r. \quad (4.49)$$

Die δ Funktion in Kugelkoordinaten lautet

$$\delta(z_1 - z) = \delta(z_1 - r \cos \vartheta) = \delta\left(r \left(\frac{z_1}{r} - \cos \vartheta\right)\right) = \frac{1}{r} \delta\left(\frac{z_1}{r} - \cos \vartheta\right). \quad (4.50)$$

In zellzentrierten Koordinaten gilt für die Ebene durch den Atommittelpunkt $z_1 = 0$. Die reellen Kugelflächenfunktionen (4.44) und die Ableitung ∂_z in Kugelkoordinaten (4.46) ergeben

$$J_{LL'} = \int_0^{R_{\text{WS}}} R_l(r; E) R_{l'}^*(r; E) dr \int_1^{-1} d(\cos \vartheta) \int_0^{2\pi} d\varphi \delta(\cos \vartheta) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) (1 - \cos^2 \vartheta) \frac{\partial}{\partial \cos \vartheta} Y_{l'm'}(\hat{\mathbf{r}}).$$

Mit der Rekursionsformel für die Legendre Polynome (4.45) und der Beziehung

$$\int_0^{2\pi} \text{trg}(m\varphi) \text{trg}(m'\varphi) d\varphi = \delta_{mm'} (1 + \delta_{m0}) \pi \quad (4.51)$$

ergibt sich

$$J_{LL'} = \delta_{mm'} (1 + \delta_{m0}) \pi (l' + |m'|) a_{lm} a_{l'm'} P_l^{|m|}(0) P_{l'-1}^{|m'|}(0) \int_0^{R_{\text{WS}}} R_l(r; E) R_{l'}^*(r; E) dr, \quad (4.52)$$

wobei für die Legendre Polynome $P_l^{|m|}(\cos \vartheta)$ bei $\cos \vartheta = 0$ gilt [75]

$$P_l^{|m|}(0) = \begin{cases} \frac{(-1)^{\frac{l+|m|}{2}}}{2^l} \frac{(l+|m|)!}{(\frac{l-|m|}{2})! (\frac{l+|m|}{2})!}, & l-m \text{ gerade} \\ 0, & l-m \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (4.53)$$

Somit können die Stromdichtematrixelemente auch durch eine Ebenenintegration durch die Mitte der Atome berechnet werden.

4.4.2 Unterschiede zum Baranger-Stone Formalismus

In diesem Abschnitt werden die Unterschiede zwischen der Leitwertberechnung nach Baranger und Stone (Abschnitt 4.3) und der in dieser Arbeit verwendeten Methode (Abschnitt 4.4) diskutiert.

Im Gegensatz zu den Elektroden mit einer endlichen Querschnittsfläche wird hier eine zweidimensionale Translationssymmetrie in dem gesamten System angenommen. Damit wird der Leitwert nicht mehr im realen, sondern in der Schichtebene im reziproken Raum berechnet, um die \mathbf{k}_{\parallel} -Erhaltung in einfacher Weise zu berücksichtigen. Da die Querschnittsfläche der Elektroden unendlich ist, wird der Leitwert auf die Fläche der zweidimensionalen

Einheitszelle normiert. Alternativ kann der Leitwert auch auf die (Einheits-) Fläche (Leitwertdichte g) normiert werden, wodurch sich der Vorfaktor in (4.39) ändert

$$g = \frac{G^{\text{WS}}}{A_{\text{WS}}} = G^{\text{WS}} \frac{A_{2\text{DBZ}}}{(2\pi)^2}. \quad (4.54)$$

Ein weiterer Unterschied sind die Positionen der beiden Ebenen A und A' , durch die die Stromdichte berechnet wird. Sie befinden sich nicht wie in der linearen Antwort Theorie im asymptotischen Bereich der Elektroden, wo alle evaneszenten Zustände bereits abgeklungen sind, sondern mehr oder weniger in der Nähe des Streuzentrums. In den meisten Systemen, besonders in Metallen aufgrund der kurzen Abschirmlänge, ist es ausreichend, die beiden Ebenen 4–20 Monolagen vom Streuzentrum, z.B. einer Grenzfläche oder einer Tunnelbarriere, entfernt zu legen. Im Halbleiter dagegen kann die Position der Ebene sehr wichtig werden, was anhand eines Beispiel in Anhang B gezeigt wird. Das dort betrachtete System ist eine Fe/GaAs(001) Heterostruktur mit einer 8 ML dicken Schottkybarriere an der Grenzfläche. Es wird der Einfluss von evaneszenten Zuständen auf den Leitwert für unterschiedliche Abstände der Ebene vom Streuzentrum diskutiert. Diese können keinen Strom transportieren, werden aber in der Bandlücke des Halbleiters nur sehr langsam gedämpft.

In der Herleitung nach Baranger und Stone sind unendlich lange und ideale Elektroden an das Streuzentrum angeschlossen. In dieser Arbeit dagegen bestehen die beiden Elektroden aus Halbräumen eines bestimmten Materials. Die einlaufenden und transmittierten Wellen sind somit Blochwellen. Schließt die Einheitszelle eines der beiden Elektrodenmaterialien zwei oder mehrere Monolagen ein, so muss der Leitwert über diese Monolagen oder ein ganzzahliges Vielfaches davon gemittelt werden. Dies wird in Anhang C anhand eines einfachen Modellkristalls, aufgebaut aus konstanten Potentialen, und an einem realen Kristall (Bulk ZnSe in der [001] Richtung) gezeigt.

Weiter können Leitwertoszillationen für unterschiedliche Ebenenabstände beobachtet werden. Diese werden in Kapitel 6 (Abschnitt 6.2.1) gezeigt. Sie entstehen durch Interferenz zweier transmittierter Blochwellen desselben Bandes, aber mit unterschiedlichen Wellenlängen bzw. k_z Komponenten. Diese Oszillationen verschwinden nicht, auch wenn, wie oben beschrieben, über alle Monolagen der Einheitszelle gemittelt wird.

Kapitel 5

Hot Spots

In diesem Kapitel werden die Hot Spots untersucht, die in vielen *ab initio* Rechnungen von Tunnelmagnetowiderständen¹ (TMR) Strukturen gefunden wurden. Diese Hot Spots sind sehr scharfe und sehr hohe Leitwertmaxima in dem \mathbf{k}_{\parallel} aufgelösten Leitwert der Minoritätselektronen. Die Elektronen in diesen Hot Spots Zuständen können die Tunnelbarriere ohne Intensitätsverlust durchqueren und bestimmen den integrierten Leitwert bis zu einer bestimmten Barrierendicke. Es wird untersucht, wodurch die Hot Spots entstehen und warum diese Elektronen die Tunnelbarriere ohne Intensitätsverlust durchdringen können. Diese Fragen und weitere Eigenschaften werden mit Hilfe eines einfachen analytischen Modells und detaillierten *ab initio* Rechnungen untersucht.

Nach einer Einleitung wird das verwendete analytische Modell erläutert, mit dem anschließend die Hot Spots untersucht werden. Im zweiten Teil des Kapitels werden die Eigenschaften der Hot Spots in detaillierten *ab initio* Rechnungen von TMR Strukturen mit einer Vakuum Tunnelbarriere untersucht und mit den Resultaten des analytischen Modells verglichen. Hier wird besonders die Co/Vakuum/Co(001) Heterostruktur diskutiert. Zur *ab initio* Berechnung wird die TB-LMTO² und die TB-KKR Green-Funktions-Methode verwendet. Am Schluss werden die Ergebnisse des Kapitels zusammengefasst und diskutiert.

5.1 Einleitung

Mit der Entdeckung des Riesen-Magnetowiderstands³ (GMR) 1988 von Fert und Mitarbeitern [8] und zeitgleich von Grünberg und Mitarbeitern [9] begann eine neue Form der Mikroelektronik, bei der der Spin des Elektrons beim Stromtransport mit einbezogen wird: die Magnetoelektronik [2]. Der GMR Effekt wird in metallischen Mehrfachlagen gefunden, die aus zwei oder mehreren ferromagnetischen Lagen bestehen, die durch nichtmagnetische Zwischenschichten⁴ separiert sind. Dabei wird ein niedrigerer Widerstand gefunden, wenn

¹Englisch: *Tunneling Magneto Resistance*

²Englisch: *Tight Binding-Linear Muffin Tin Orbital*

³Englisch: *Giant Magneto Resistance*

⁴Englisch: *Spacer*

die magnetischen Momente der benachbarten Ferromagnete parallel und ein höherer, wenn diese antiparallel ausgerichtet sind. So lassen sich maximale relative Widerstandsänderungen (normiert auf den Widerstand bei der parallelen Ausrichtung) von über 200% bei 4.2K [76] und etwa 70% bei Zimmertemperatur erzielen. Heutzutage werden solche GMR Sensoren z.B. sehr erfolgreich als Leseköpfe in Festplatten eingesetzt.

Eine andere sehr erfolgversprechende Anwendung sind magnetische Speicher⁵ (MRAM), die den Vorteil haben, dass sie die gespeicherte Information auch bei ausgeschalteter Stromversorgung behalten können (sogenannte nichtflüchtige Speicher). Mit Hilfe eines GMR Elementes in MRAMs ließe sich die gespeicherte Information (Magnetisierungsrichtung) elektronisch auslesen und durch ein Magnetfeld ändern bzw. schreiben. Allerdings haben GMR Elemente den entscheidenden Nachteil, dass sie aufgrund der metallischen Leitfähigkeit im Vergleich zu typischen Halbleiterschaltungen einen sehr niedrigen Sperrwiderstand besitzen. Das bedeutet auch einen relativ hohen Strom und somit einen hohen Stromverbrauch. Besser geeignet dafür sind sogenannte Tunnelmagnetowiderstände⁶ (TMR), die zum ersten Mal 1975 von Julliere [77] untersucht wurden. Diese sind aus zwei ferromagnetischen Elektroden aufgebaut, die durch eine in der Regel nichtmagnetische Tunnelbarriere getrennt sind. In den meisten Fällen wird ein niedrigerer Widerstand für parallel ausgerichtete magnetische Momente der Ferromagneten und ein höherer für die antiparallele Ausrichtung gefunden. Miyazaki und Mitarbeiter [78] sowie Moodera und Mitarbeiter [79] erreichten 1995 einen TMR Effekt (relative Widerstandsänderung normiert auf den Widerstand in der parallelen Konfiguration) von etwa 20% bei Zimmertemperatur. Inzwischen konnten sogar Werte in epitaktischen Fe/MgO/Fe Heterostrukturen von 100% bei 80K erreicht werden [80]. Werden ferromagnetische Halbmetalle, z.B. $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$, die eine metallische Leitfähigkeit für die eine Spinrichtung zeigen und einen Isolator für die andere Richtung darstellen, als Elektrode verwendet, können TMR Werte bis 1800% bei 4K gemessen werden [81]. Durch die Tunnelbarriere liegen die Widerstandswerte von TMR Elementen etwa in demselben Bereich wie für Halbleiterbauelemente üblich und benötigen einen viel geringeren Strom als GMR Elemente.

5.1.1 Tunnelmagnetowiderstand

Der TMR Effekt wird angegeben als relative Widerstandsänderung zwischen der parallelen R_P und der antiparallelen R_{AP} Konfiguration. Dabei gibt es zwei unterschiedliche Definitionen: die meistens benutzte “optimistische” Definition

$$\text{TMR} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P}, \quad \text{mit} \quad -100\% \leq \text{TMR} < \infty \quad (5.1)$$

und die “pessimistische” Definition

$$\text{TMR} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_{AP}}, \quad \text{mit} \quad -\infty < \text{TMR} \leq 100\%. \quad (5.2)$$

⁵Englisch: *Magnetic Random Access Memory*

⁶Englisch: *Tunneling Magneto Resistance*

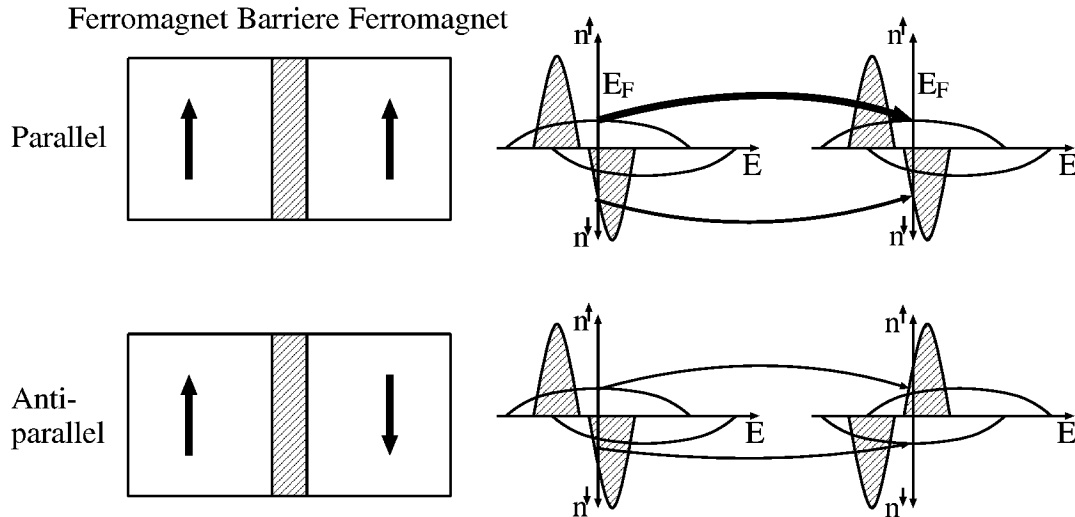


Abbildung 5.1: Schematischer Schichtaufbau eines TMR Elementes (links) und qualitative Erklärung des TMR Effektes (rechts). In der oberen Zeile sind die magnetischen Momente der beiden ferromagnetischen Elektroden parallel und in der unteren Zeile antiparallel ausgerichtet. Dargestellt ist rechts die spinaufgelöste Zustandsdichte der beiden ferromagnetischen Elektroden. Die Transmissionswahrscheinlichkeit für injizierte Elektronen mit Spin auf und Spin ab an der Fermienergie ist über die Linienbreite der Pfeile angedeutet. In der Zustandsdichte ist schematisch der flache s, p Anteil sowie die hohen Zustandsdichten der d Elektronen gezeichnet.

Ein negativer TMR Wert bedeutet, dass der Widerstand für die antiparallele Ausrichtung niedriger ist als für die parallele [82].

In Abbildung 5.1 wird ein typischer Aufbau eines TMR Elementes und eine qualitative Erklärung des Effektes gezeigt. Da in der Regel die Tunnelbarriere sehr dünn ist, können die Elektronen die Barriere ballistisch durchqueren. Weiter wird vorausgesetzt, dass die Elektronen ihre Spinrichtung beibehalten. In der spinaufgelösten Zustandsdichte auf der rechten Seite sind die sp -artigen Bänder durch einen flachen Untergrund und die lokalisierten d -Bänder durch schmale Maxima mit einer hohen Zustandsdichte angedeutet. Sind die magnetischen Momente der beiden Ferromagneten parallel ausgerichtet (obere Zeile), so ist die Transmission hoch, da auf beiden Seiten der Barriere identische sp -artige Zustände für Majoritätselektronen vorhanden sind. Diese können die Tunnelbarriere besser durchqueren als die d -Bänder, da sie weniger Oszillationen in der Schichtebene aufweisen [83]. Die Oszillationen bedeuten eine hohe Energie, die für die kinetische Energie zum Durchqueren der Barriere nicht mehr zur Verfügung steht.

Für antiparallel ausgerichtete magnetische Momente (untere Zeile) findet ein injiziertes sp -artiges Majoritätselektron im anderen Ferromagneten nur d -artige Minoritätszustände, an die es aufgrund der unterschiedlichen Orbitale nur schwach koppeln kann. Das gleiche gilt für injizierte Minoritätselektronen, die auf Majoritätszustände treffen. Diese Erklärung

ist allerdings sehr qualitativ und berücksichtigt zum Beispiel nicht die Symmetrie der Blochwellen und deren unterschiedliches Dämpfungsverhalten in der Tunnelbarriere. Weiter werden Grenzflächeneigenschaften, durch die die hier behandelten Hot Spots hervorgerufen werden, nicht betrachtet. Hierauf wird bei der Diskussion der *ab initio* Ergebnisse genauer eingegangen.

Zur quantitativen Erklärung des TMR Effektes gibt es verschiedene Ansätze: Julliere [77] hat den Effekt über die Polarisierung der Majoritäts- und Minoritätselektronen an der Fermienergie erklärt und erhält mit der optimistischen Definition

$$\text{TMR} = \frac{2PP'}{1 + PP'}. \quad (5.3)$$

P, P' sind die Polarisierungen der beiden Ferromagnete an der Fermienergie, definiert als die relative Zustandsdichte

$$P = \frac{N^\uparrow(E_F) - N^\downarrow(E_F)}{N^\uparrow(E_F) + N^\downarrow(E_F)}. \quad (5.4)$$

Das Modell von Julliere hat den Nachteil, dass es die Eigenschaften der Tunnelbarriere nicht berücksichtigt und den TMR Effekt allein der Spinpolarisation der Ferromagnete zuschreibt.

Das einfachste Modell, das eine Tunnelbarriere beschreibt, ist eine konstante Potentialbarriere und einlaufende freie Elektronen, die teilweise reflektiert und teilweise transmittiert werden. Dabei werden für Majoritäts- und Minoritätselektronen unterschiedliche konstante Potentiale, V_\uparrow und V_\downarrow , in den Elektroden angenommen. Die Transmission in Abhängigkeit der Komponente des reziproken Vektors in der Grenzflächenebene \mathbf{k}_\parallel lautet [84]

$$T(\mathbf{k}_\parallel) = \frac{16k_\uparrow\kappa^2k_\downarrow e^{2D\kappa}}{\{\kappa(k_\uparrow + k_\downarrow) [1 + e^{2D\kappa}]\}^2 + \{(\kappa^2 - k_\uparrow k_\downarrow) [1 - e^{2D\kappa}]\}^2}. \quad (5.5)$$

Dabei ist D die Barrierendicke, $k_{\uparrow,\downarrow} = \sqrt{E_F - V_{\uparrow,\downarrow} - \mathbf{k}_\parallel^2}$ der Wellenvektor in den Elektroden für Majoritäts- und Minoritätselektronen und $\kappa = \sqrt{V_B + \mathbf{k}_\parallel^2 - E_F}$. E_F ist die Fermienergie und V_B die Höhe der Potentialbarriere, wobei gelten soll $V_\uparrow < V_\downarrow < E_F < V_B$. Der Potentialunterschied $V_\uparrow - V_\downarrow$ beschreibt die Austauschspaltung der Majoritäts- und Minoritätselektronen im Ferromagneten. Im Grenzfall von dicken Barrieren ergibt sich das Modell von Slonczewsky [85], das das Ergebnis von Julliere in Gleichung (5.3) mit effektiven, von der Potentialbarriere und den Elektroden abhängigen Polarisierungen P_{eff} beschreibt

$$P_{\text{eff}} = P \frac{\kappa_0^2 - k_\uparrow k_\downarrow}{\kappa_0^2 + k_\uparrow k_\downarrow}. \quad (5.6)$$

Hierbei werden $\kappa_0 = \kappa(\mathbf{k}_\parallel = 0)$, k_\uparrow und k_\downarrow bei $\mathbf{k}_\parallel = 0$ ausgewertet. P ist die Spinpolarisation im Modell von Julliere (5.4).

In der Arbeit von MacLaren und Mitarbeitern [84] werden die Modelle von Julliere und Slonczewsky mit *ab initio* Fe/Vakuum/Fe Rechnungen verglichen. Dabei zeigt sich, dass

diese Modelle sich nicht zur Interpretation und zum Verständnis der *ab initio* Ergebnisse eignen, da die Blochelektronen in den Ferromagneten ein anderes Verhalten als freie Elektronen zeigen. Beispielsweise wird im Kapitel über die ballistische Spininjektion in dieser Arbeit (Kapitel 6) gezeigt, dass die Symmetrie der Blochwellen sehr wichtig für das Durchqueren einer Grenzfläche oder Tunnelbarriere ist. Außerdem besitzen Isolatorschichten wie Al_2O_3 oder MgO ein komplexeres Dämpfungsverhalten der Blochwellen als eine Potentialbarriere oder Vakuum. Das exponentielle Abklingen in der Barriere wird beschrieben durch die komplexe Bandstruktur [86], d.h. durch die Verallgemeinerung der reellen Bandstruktur bei der der reziproke Vektor auch komplexwertig sein darf: $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k} + i\boldsymbol{\kappa}$. Im Bulk⁷ sind nur reelle Lösungen zugelassen, da die komplexen $\tilde{\mathbf{k}}$ Vektoren die Translationssymmetrie verletzen. An einer Grenzfläche jedoch können diese in den Isolatorhalbraum hinein exponentiell abfallen und bestimmen so die Dämpfungen der Blochwellen. Da sie in der Bandlücke liegen und von dem metallischen Halbraum erzeugt werden, werden sie auch MIGS⁸ [87] genannt. Die Dämpfungsfaktoren $\boldsymbol{\kappa}$ für die komplexen Bänder in dem Isolator hängen wie bei der reellen Bandstruktur von der Symmetrie der betrachteten Bänder ab. Daher wird klar, dass die Bänder des Ferromagneten, die an das komplexe Band im Isolator mit dem kleinsten $\boldsymbol{\kappa}$ ankoppeln können, die Barriere am besten durchqueren können. Somit ist zum Verständnis des Tunnelprozesses die Bandstruktur der Ferromagneten sowie die komplexe Bandstruktur des Isolators wichtig. Inzwischen gibt es eine Reihe von *ab initio* Rechnungen zu TMR Strukturen mit realen Tunnelbarrieren wie MgO [21, 28], Ge [24], GaAs [22, 24], ZnSe [22, 27], Si [22] oder auch Vakuumbarrieren [25, 84, 88]. Als ferromagnetische Elektroden wurden Fe , Ni oder Co angenommen.

In dieser Arbeit wird ein Effekt behandelt, der ebenfalls in den Modellen von Julliere und Slonczewsky nicht enthalten ist: Für bestimmte \mathbf{k}_{\parallel} Vektoren können die Minoritätselektronen die Barriere ohne jeglichen Intensitätsverlust durchqueren. Dies wird durch resonante Grenzflächenzustände hervorgerufen und wurde in *ab initio* Rechnungen von TMR Strukturen gefunden. Dieses interessante Phänomen wird im folgenden Abschnitt näher diskutiert.

5.1.2 Co/Vakuum/Co(001) TMR Struktur

Im Folgenden werden die *ab initio* Ergebnisse des Leitwertes einer Co/Vakuum/Co(001) TMR Struktur diskutiert. Dabei wurde als einfachstes Modell für eine Tunnelbarriere eine Vakuumschicht benutzt. Dies hat auch den Vorteil, dass die Ergebnisse mit dem weiter unten vorgestellten analytischen Modell verglichen werden können. In Abbildung 5.2 ist die Kristallstruktur einer $\text{Co/4 Monolagen Vakuum/Co(001)}$ Heterostruktur dargestellt. Die Vakuumbarriere wird durch Leerstellen an den idealen Co Positionen beschrieben. Das bedeutet, dass die fcc-Struktur von Co in der Barriere fortgesetzt und die Barriere monolagenweise mit "Vakuumatomen" aufgefüllt wird. Der Abstand der beiden Co Grenzflächenmonolagen ist bei einer N Monolagen (ML) dicken Vakuumbarriere gegeben durch

⁷Volumenkristall

⁸Englisch: *Metal Induced Gap States*

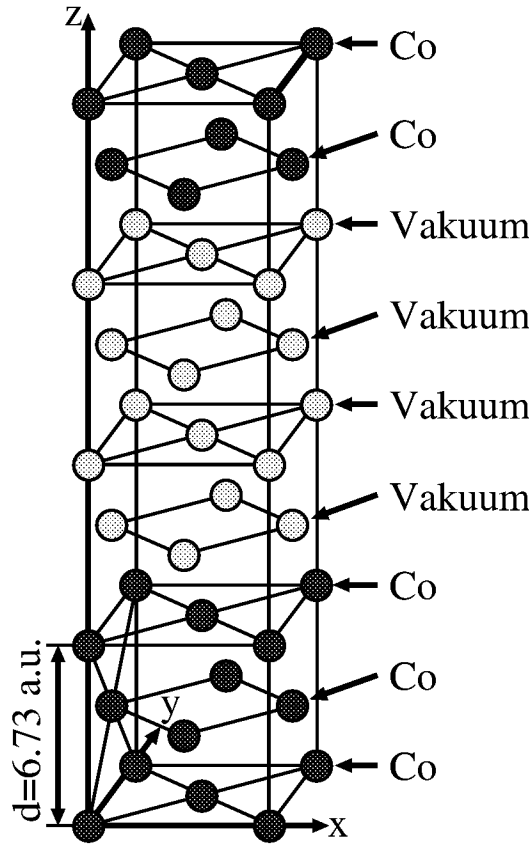


Abbildung 5.2: Gitterstruktur der Co/4 ML Vakuum/Co(001) Heterostruktur. Vom fcc-Co Halbraum sind nur die ersten drei bzw. zwei Monolagen gezeichnet.

$d = \frac{N+1}{2}d_{\text{Co}}$ mit $d_{\text{Co}} = 6.73$ a.u. Durch die ideale Fortsetzung ist eine wichtige Annahme erfüllt, nämlich die perfekte zweidimensionale Translationssymmetrie. Dadurch bleibt die Komponente des reziproken Vektors in der Grenzflächenebene \mathbf{k}_{\parallel} beim Durchqueren der Barriere erhalten, und der Leitwert kann in Abhängigkeit von \mathbf{k}_{\parallel} untersucht werden. Weiter sind in den Rechnungen ideale Grenzflächen ohne Rauigkeit oder Gitterrelaxationen angenommen worden. Die Heterostruktur ist in [001] Richtung orientiert, die eine C_{4v} Symmetrie besitzt, d.h. eine vierfache Rotationsachse mit zwei Spiegelebenen parallel zur [001] Achse. Daher müssen nur die \mathbf{k}_{\parallel} Vektoren in einem Viertel der zweidimensionalen Brillouinzone (2DBZ) (irreduzibler Teil) berechnet werden, da alle anderen äquivalent sind.

Die beiden Bulk Co(001) Halbräume werden mit Hilfe der Dezimationstechnik berechnet [58]. Dazwischen befinden sich die Potentiale der Vakuumbarriere sowie 4 ML vom Volumen abweichenden Co Potentialen, die selbstkonsistent berechnet werden. Die Potentiale werden in der sphärisch symmetrischen ASA⁹ Näherung beschrieben. Besonders in der Vakuumbarriere kann dies zu kleinen Ungenauigkeiten führen, da zum einen eine kon-

⁹Englisch: *Atomic Sphere Approximation*

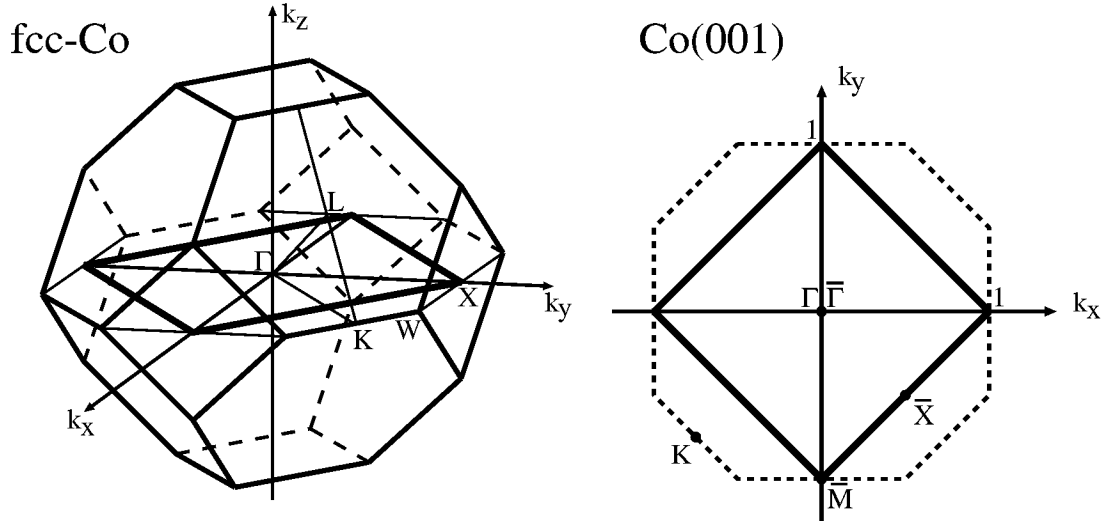


Abbildung 5.3: Bulk Co Brillouinzone (links) und zweidimensionale Brillouinzone von Co(001) (rechts). Links ist die zweidimensionale Brillouinzone durch dicke Linien in der Bulk Brillouinzone eingezeichnet. Die reziproken Vektoren sind in Einheiten von $2\pi/d_{\text{Co}}$ angegeben.

stante Potentialbarriere und zum anderen die exponentiell abklingenden Wellenfunktionen nicht korrekt beschrieben werden. Aber für die hier diskutierten Effekte ist die Genauigkeit ausreichend.

Da im Folgenden der Leitwert durch die Tunnelbarriere in Abhängigkeit des \mathbf{k}_{\parallel} Vektors dargestellt wird, wird in Abbildung 5.3 die 2DBZ von Co(001) sowie die Bulk Co Brillouinzone gezeigt. In der 2DBZ ist der X-Punkt gegenüber dem \bar{X} Punkt in der Bulk Brillouinzone um 45° gedreht. Im Folgenden ist besonders die $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} Hochsymmetrielinie wichtig.

Der Stromtransport durch eine Vakuumbarriere ist stets ballistisch, was auch oft für reale, dünne Isolatorbarrieren (z.B. ZnSe, MgO) gilt. Daher wird der Leitwert G für die Majoritäts- und Minoritätselektronen im Landauer-Büttiker Formalismus [60, 68] berechnet (siehe Kapitel 4). Der Leitwert bei einer antiparallelen Ausrichtung der magnetischen Momente der beiden Co Halbräume ist aus Symmetriegründen für jede Spinrichtung identisch, so dass in diesem Fall nur der Leitwert einer Spinrichtung angegeben wird.

Ballistischer Leitwert

In diesem Abschnitt wird der berechnete Leitwert in der Co/Vakuum/Co(001) Heterostruktur diskutiert. Er ist in Abbildung 5.4 für die Majoritäts- und Minoritätselektronen bei einer parallelen Ausrichtung der magnetischen Co Momente sowie für die antiparallele Ausrichtung in der 2DBZ dargestellt. Der Leitwert für Majoritätselektronen (links oben) zeigt einen gleichmäßigen Verlauf mit einem Maximum von etwa $3 \times 10^{-3} e^2/h$ am $\bar{\Gamma}$ Punkt, d.h.

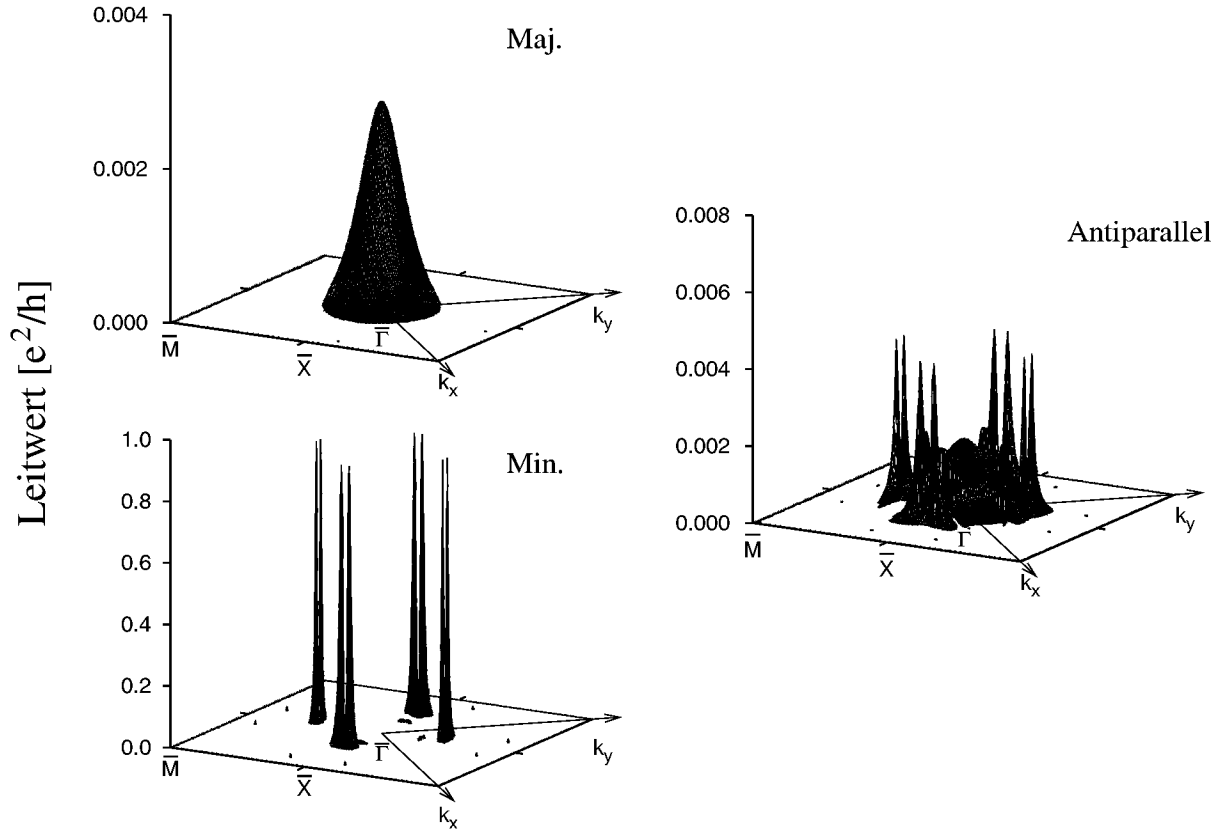


Abbildung 5.4: Leitwerte aus *ab initio* KKR Rechnungen von Co/4 ML Vakuum/Co(001) Strukturen als Funktion des \mathbf{k}_{\parallel} -Vektors in der 2DBZ. Die magnetischen Momente der beiden Co Halbräume sind links oben (Majoritätselektronen) und links unten (Minoritätselektronen) parallel und im rechten Bild antiparallel ausgerichtet. Für eine geeignete Darstellung wurden unterschiedliche Leitwertskalen verwendet.

Elektronen, die senkrecht auf die Barriere auftreffen, können diese am leichtesten durchqueren. Für Zustände etwas vom $\bar{\Gamma}$ Punkt entfernt nimmt der Leitwert rasch ab. Dieses Verhalten entspricht dem von freien Elektronen, die eine Potentialbarriere der Höhe V_B durchqueren. In diesem Fall ergibt sich ein Leitwert für große Barrierendicken D von

$$G(\mathbf{k}_{\parallel}) \propto e^{-2\sqrt{V_B + \mathbf{k}_{\parallel}^2 - E_F} D},$$

wobei E_F die Fermienergie ist. Weiter ist $G(\mathbf{k}_{\parallel})$ rotationssymmetrisch um die k_z Achse, d.h. der [001] Richtung. Dieses wird von den Co Majoritätsbänder verursacht, die eine Δ_1 Symmetrie am $\bar{\Gamma}$ Punkt und somit die volle Rotationssymmetrie um die [001] Achse besitzen. Diese Eigenschaft gilt noch näherungsweise für Zustände in der Nähe des $\bar{\Gamma}$ Punktes.

Ein völlig unterschiedliches Bild ergibt der Leitwert der Minoritätselektronen (in Abbildung 5.4 links unten). Der Leitwert wird dominiert von vier Doppelmaxima, die sich zwi-

schen dem $\bar{\Gamma}$ und \bar{X} Punkt befinden. Sie haben einen maximalen Leitwert von $1 e^2/h$ bzw. eine maximale Transmissionswahrscheinlichkeit von 1. Das bedeutet, dass die Elektronen in diesen Stromkanälen die Tunnelbarriere ohne Intensitätsverlust durchqueren können. Dies gilt für bestimmte Blochwellen, die schräg auf die Barriere auftreffen. Die Leitwerte aller anderen Zustände sind bereits um mehrere Größenordnungen kleiner und spielen für den integrierten Leitwert keine Rolle. Diese Maxima werden Hot Spots genannt und stehen im Mittelpunkt dieses Kapitels. Ihre Eigenschaften werden im nächsten Unterabschnitt näher vorgestellt.

Der Leitwert bei einer antiparallelen Ausrichtung der magnetischen Momente in den Co Halbräumen (in Abbildung 5.4 rechts) scheint das geometrische Mittel der Leitwerte der Majoritäts- und Minoritätselektronen bei der parallelen Konfiguration zu sein. Das Maximum am $\bar{\Gamma}$ Punkt hat eine Höhe von etwa $2 \times 10^{-3} e^2/h$ und liegt somit in derselben Größenordnung wie bei den Majoritätselektronen. Die vier Maxima sind ebenfalls sichtbar, aber ihr Leitwert ist um einen Faktor 250 kleiner als bei den Minoritätselektronen. Für den integrierten Leitwert sind sie ohne Bedeutung.

5.1.3 Hot Spots

Im vorherigen Abschnitt wurde der berechnete Leitwert für eine Co/Vakuum/Co(001) TMR Struktur diskutiert. Dabei zeigen die Minoritätselektronen in der parallelen Konfiguration ein sehr interessantes Phänomen: Elektronen aus einem sehr kleinen Bereich der 2DBZ können die Tunnelbarriere praktisch ohne Intensitätsverlust durchqueren, d.h. sie sehen keine Barriere. Diese Maxima im Leitwertbild $G(\mathbf{k}_{\parallel})$ werden deswegen in der Literatur auch “Hot Spots” genannt. Sie dürfen nicht mit den Hot Spots im Realraum verwechselt werden, die durch kleine Löcher¹⁰ oder Störstellen in der Isolatorschicht verursacht werden und ebenfalls einen sehr hohen Leitwert im Vergleich zu den Tunnelzuständen besitzen. Wird der gesamte Leitwert der Minoritätselektronen über die 2DBZ integriert, so wird dieser von den Hot Spots bestimmt, da die Leitwerte aller anderen Zustände um mehrere Größenordnungen kleiner sind. In diesem Kapitel wird der Ursprung und die Eigenschaften dieser Hot Spots mit Hilfe eines analytischen Modells und detaillierten *ab initio* Berechnungen untersucht.

Es liegt nahe, bei diesen Maxima an numerische Ungenauigkeiten bei der komplexen Berechnung des Leitwertes zu denken. Es wurde aber in der Literatur [21] gezeigt, dass die Hot Spots an Stellen in der 2DBZ auftreten, an denen die Zustandsdichte der ferromagnetischen Grenzflächenmonolage sehr hoch ist, d.h. wo ein Grenzflächenzustand an der Fermienergie vorhanden ist. Der hohe Leitwert wurde daher dem verstärkten Transport durch die Grenzflächenzustände zugeschrieben. Dennoch konnten damit folgende Eigenschaften der Hot Spots nicht befriedigend erklärt werden:

- Warum sehen die Elektronen in den Hot Spots keine Barriere, bzw. warum können die Elektronen bis zu einer bestimmten Barrierendicke die Tunnelbarriere ohne Intensitätsverlust, d.h. mit $|t|^2 = 1$, durchqueren? Was sind die physikalischen Ursachen?

¹⁰Englisch: *Pin holes*

- Warum bestimmen die Hot Spots den integrierten Leitwert bis zu einer bestimmten Barrierendicke?
- Warum tritt die verlustfreie Transmission der Hot Spots in allen bisher bekannten Rechnungen nur für Minoritätselektronen bei einer parallelen Konfiguration der magnetischen Momente auf, nicht aber für die antiparallele Konfiguration (Abbildung 5.4)?
- Warum sind die Hot Spots so empfindlich auf leichte Asymmetrien in der Tunnelbarriere (z.B. unterschiedliche Elektroden, Grenzflächenrauigkeit, angelegte Bias Spannung)?

Die Hot Spots bereiten große Schwierigkeiten bei der numerischen Berechnung, da sie für dünne Barrieren in einem sehr kleinen Bereich der 2DBZ den größten Teil des Gesamtleitwertes tragen. Das bedeutet, dass eine sehr hohe Anzahl von \mathbf{k}_{\parallel} Punkten in der irreduziblen Brillouinzone berechnet werden muss, um verlässliche Ergebnisse zu erhalten. An dieser Stelle sei betont, dass die Hot Spots keine besondere Eigenschaft der Vakuum Tunnelbarriere sind, sondern auch in *ab initio* TMR Rechnungen mit Isolatorbarrieren wie MgO [21, 28] gefunden wurden. Wir betrachten nur der Einfachheit halber und zum leichteren Vergleich mit dem im Folgenden skizzierten analytischen Modell eine Vakuumbarriere.

5.2 Analytisches Modell der Hot Spots

5.2.1 Beschreibung des Modells

Um die Eigenschaften und das Zustandekommen der Hot Spots zu studieren, wird in diesem Abschnitt ein analytisches Modell vorgestellt, das eine möglichst einfache Beschreibung der Hot Spots erlaubt. Der Potentialverlauf des Modells ist in Abbildung 5.5 schematisch dargestellt. Das Modell besteht aus drei Raumbereichen: Zwei Elektroden (Kristall A und C) mit von z unabhängigem Potential, das aber in x - und y -Richtung oszillatorisch variiert: $V_{A,C} = V(x, y)$. In z Richtung sei das Kristallpotential konstant. Diese Elektroden repräsentieren die beiden ferromagnetischen Schichten in einer TMR Struktur. Dazwischen befindet sich eine Tunnelbarriere mit einer Dicke D und einem konstanten abstoßenden Potential V_B . Zusätzlich können Grenzflächenzustände durch anziehende δ -förmige Potentiale eingefügt werden.

Um die Transmission durch die Barriere zu berechnen, müssen zuerst die Lösungen der Schrödingergleichung in den drei Bereichen gefunden werden, was in den nächsten Abschnitten diskutiert wird. Dabei werden die Wellenfunktionen im Modell nahezu freier Elektronen beschrieben und nur Bänder bis zum ersten reziproken Gittervektor mitgenommen. Wie im Folgenden gezeigt wird, reicht dies zur Erklärung der Hot Spots aus. Anschließend werden die Lösungen an den Grenzflächen aneinander angepasst, wobei eine von links einlaufende, eine nach links reflektierte und eine nach rechts transmittierte

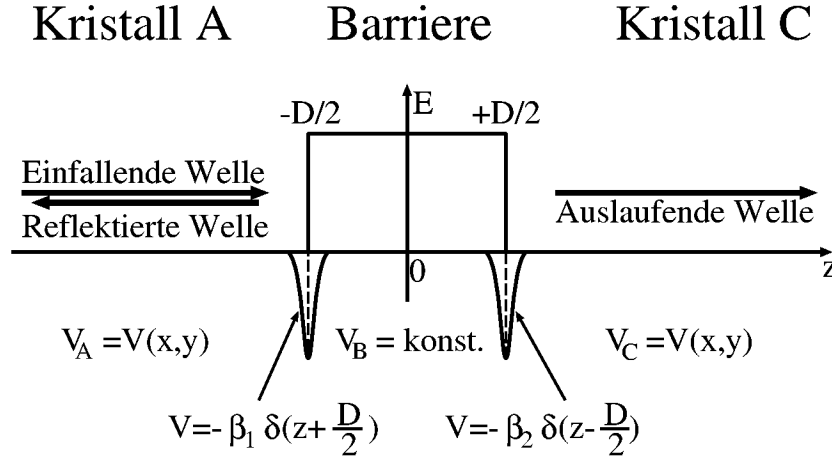


Abbildung 5.5: Schematischer Aufbau des analytischen Modells. Es besteht aus zwei Halbräumen (Kristall A und C), die durch eine Potentialbarriere mit der Dicke D getrennt sind. Die δ -förmigen Potentiale an den beiden Grenzflächen sind schematisch angedeutet.

Welle angenommen werden. In der Tunnelbarriere werden die Wellen mehrfach reflektiert, weshalb dort sowohl exponentiell abfallende als auch ansteigende Lösungen berücksichtigt werden müssen ($e^{+\kappa z}$ und $e^{-\kappa z}$). Der gesuchte Leitwert bzw. die Transmission wird anschließend aus der Transmissionsmatrix mit Hilfe der Landauer-Büttiker Formel berechnet.

Wellenfunktionen in den Elektroden

Das in unserem Modell angenommene Gitterpotential in den Elektroden ist konstant in Richtung senkrecht zu den Schichten (z Richtung) und zeigt eine kleine Variation in x und y Richtung parallel zu den Schichten. Das Potential wird in x, y Richtung mit Hilfe einer Fourierentwicklung bis zum ersten reziproken Gittervektor g_x und g_y beschrieben

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{n'_x, n'_y=-1}^1 V_{n'_x, n'_y} e^{i(n'_x g_x x + n'_y g_y y)}. \quad (5.7)$$

Da $V_{0,0}$ das konstante, mittlere Potential im Kristall beschreibt, wird es im Folgenden o.E.d.A. gleich Null gesetzt. Gleichzeitig gilt $V_{n'_x, n'_y} = V_{-n'_x, -n'_y}$, da das Potential reell ist. Infolge der Gitterperiodizität in x, y Richtung und dem konstanten Potential in z Richtung wird eine ebene Welle in z und eine Blochwelle in x, y Richtung als Ansatz angenommen

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{ik_z z} u_{\mathbf{k}_{\parallel}}(x, y) e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (5.8)$$

wobei \mathbf{k} der reziproke Vektor mit den Komponenten $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$ parallel zur Schichtebene und k_z senkrecht dazu ist. Die gitterperiodische Modulation der Blochwelle $u_{\mathbf{k}_{\parallel}}(x, y)$ wird

ebenfalls in eine Fourierreihe bis zum ersten reziproken Gittervektor entwickelt

$$u_{\mathbf{k}_{\parallel}}(x, y) = \sum_{n_x, n_y=-1}^1 c_{n_x, n_y}(\mathbf{k}_{\parallel}) e^{i(n_x g_x x + n_y g_y y)}. \quad (5.9)$$

Zur Vereinfachung wird folgende Notation eingeführt

$$\begin{array}{ccc} (n_x, n_y) & \Rightarrow & \mathbf{n} \\ (-1, -1) & \Leftrightarrow & n_1 \\ (-1, 0) & \Leftrightarrow & n_2 \\ (-1, +1) & \Leftrightarrow & n_3 \\ (0, -1) & \Leftrightarrow & n_4 \\ \vdots & & \vdots \\ (+1, +1) & \Leftrightarrow & n_9. \end{array} \quad (5.10)$$

Somit erhält man aus der Schrödingergleichung ein lineares, homogenes Gleichungssystem, mit dem die $c_{n_x, n_y}(\mathbf{k}_{\parallel}) = c_{\mathbf{n}}(\mathbf{k}_{\parallel})$ bestimmt werden

$$\begin{aligned} & \left[k_z^2 + (k_x + n_x g_x)^2 + (k_y + n_y g_y)^2 - E \right] c_{n_i}(\mathbf{k}_{\parallel}) + \\ & \sum_{i'=1}^9 V_{n_x-n'_{x'}, n_y-n'_{y'}} c_{n_{i'}}(\mathbf{k}_{\parallel}) = 0. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Zum Lösen dieses Gleichungssystems wird es in Matrixschreibweise dargestellt

$$\left(\mathbf{A} - (-k_z^2) \mathbf{1} \right) \cdot c_{\mathbf{n}}(\mathbf{k}_{\parallel}) = 0, \quad (5.12)$$

wobei \mathbf{A} eine (9×9) Matrix gemäß Gleichung (5.11) ist. Die notwendige Bedingung für nicht-triviale Lösungen wird somit ein Eigenwertproblem: $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{1}) = 0$, mit $k_z^2 = -\lambda$. Mit einer gegebenen Energie E sowie k_x und k_y erhält man neun mögliche Lösungen (Bänder) λ^ν ($\nu = 1, \dots, 9$). Da \mathbf{A} eine reelle und symmetrische Matrix (siehe Gleichung (5.11)) ist, sind alle λ^ν reell. Ist $\lambda^\nu < 0$ so werden propagierende Zustände ($k_z^\nu = \pm \sqrt{-\lambda^\nu}$) beschrieben, die den Strom transportieren können. Für $\lambda^\nu > 0$ erhält man exponentiell abfallende Zustände ($k_z^\nu = \pm i \sqrt{\lambda^\nu}$), die z.B. für die Grenzflächenzustände wichtig sind. Mit den Lösungen k_z^ν werden die Entwicklungskoeffizienten der Wellenfunktionen $c_{\mathbf{n}}^\nu(\mathbf{k}_{\parallel})$ als Eigenvektoren zur Eigenwertgleichung (5.12) berechnet.

Der Anteil der Wellenfunktion in der x - y Ebene wird auf die Fläche der zweidimensionalen Einheitszelle A_{WS} normiert. Damit ist die Wellenfunktion für verschiedene Bänder ν orthonormal bezüglich der Integration über der zweidimensionalen Einheitszelle in x - y Richtung und dem Grundgebiet in z Richtung, da in dieser Richtung die Wellenfunktion aus einer ebenen Welle $e^{ik_z z}$ besteht. Die Normierungskonstante $N^\nu(\mathbf{k}_{\parallel})$ für das ν -te Band lautet

$$\left(N^\nu(\mathbf{k}_{\parallel}) \right)^2 = \frac{1}{A_{\text{WS}}} \int_{x=-\frac{a_x}{2}}^{\frac{a_x}{2}} \int_{y=-\frac{a_y}{2}}^{\frac{a_y}{2}} \left| \sum_{i=1}^9 c_{n_i}^\nu(\mathbf{k}_{\parallel}) e^{i(k_x + n_x g_x)x} e^{i(k_y + n_y g_y)y} \right|^2 dy dx, \quad (5.13)$$

wobei a_x die Gitterkonstante in x - und a_y die in y -Richtung ist. Dies ergibt 81 Terme, von denen aber die mit $(n_x \neq n_y)$ Null sind, da sie eine Integration über eine volle Periode bedeuten. Übrig bleibt

$$\left(N^\nu(\mathbf{k}_\parallel)\right)^2 = \sum_{i=1}^9 \left|c_{n_i}^\nu(\mathbf{k}_\parallel)\right|^2 \stackrel{!}{=} 1. \quad (5.14)$$

Die allgemeine Form der Wellenfunktion in den Elektroden für das ν -te Band in Abhängigkeit von $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_\parallel, k_z)$ und \mathbf{r} lautet

$$\psi_{\mathbf{k}}^\nu(\mathbf{r}) = \frac{e^{ik_z z} \sum_{i=1}^9 c_{n_i}^\nu(\mathbf{k}_\parallel) e^{i(k_x + n_x g_x)x} e^{i(k_y + n_y g_y)y}}{\sqrt{\sum_{i=1}^9 \left|c_{n_i}^\nu(\mathbf{k}_\parallel)\right|^2}}. \quad (5.15)$$

Wellenfunktionen in der Barriere

Die Potentialbarriere wird durch ein konstantes Potential V_B beschrieben. Daher sind die Lösungen der Schrödingergleichung exponentiell gedämpfte Wellen (für $E < V_B$). Um später diese Wellenfunktionen für alle x und y Werte an die Wellenfunktionen in den Elektroden anzupassen, müssen diese dieselbe oszillatorische Abhängigkeit in x, y Richtung aufweisen. Daher werden sie ebenfalls in x, y Richtung als Fourierentwicklung bis zu den ersten reziproken Gittervektoren der Elektroden entwickelt. Die neun möglichen Lösungen lauten ($\nu = 1, \dots, 9$)

$$\phi_{\mathbf{k}_\parallel}^\nu(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^9 \left(a_{n_i}^\nu(\mathbf{k}_\parallel) e^{-\kappa_{n_i}(\mathbf{k}_\parallel)z} + b_{n_i}^\nu(\mathbf{k}_\parallel) e^{\kappa_{n_i}(\mathbf{k}_\parallel)z} \right) e^{i(k_x + n_x g_x)x} e^{i(k_y + n_y g_y)y}. \quad (5.16)$$

Eingesetzt in die Schrödingergleichung ergeben sich die Abklingkonstanten κ_{n_i}

$$\kappa_{n_i}(\mathbf{k}_\parallel) = \sqrt{V_B - E + (k_x + n_x g_x)^2 + (k_y + n_y g_y)^2}. \quad (5.17)$$

Da $V_B > E$ sein soll (Potentialbarriere), sind die κ reell für jedes k_x und k_y . Hieraus lässt sich erkennen, dass Wellen mit einer starken oszillatorischen Komponente in der x - y -Ebene, also für $n_x \neq 0$ oder $n_y \neq 0$, schneller in der Barriere gedämpft werden (siehe [83]). Anschaulich kann dies damit erklärt werden, dass sie stärker in der Grenzflächenebene oszillieren, wodurch sie eine höhere kinetische Energie benötigen, die dann nicht mehr für den Tunnelprozess zur Verfügung steht.

Grenzflächenzustände

Um in dem analytischen Modell den Einfluss von Grenzflächenzuständen zu beschreiben, können an beiden Grenzflächen $z = \mp D/2$ anziehende, δ -förmige Potentiale hinzugefügt werden

$$V_G(z) = -\beta_{1,2} \delta\left(z \pm \frac{D}{2}\right), \quad (5.18)$$

wobei β_1 die Stärke des Potentials an der linken Grenzfläche ($z = -D/2$) und β_2 die an der rechten ($z = D/2$) ist. Um die Auswirkung der δ Funktion zu untersuchen, wird zunächst ein einfacher, eindimensionaler Fall diskutiert. Das hierfür angenommene Potential sei $v(z) - \beta\delta(z)$. Die Lösungen links und rechts von der δ Funktionen seien

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_l(z) & , z < 0 \\ \psi_r(z) & , z > 0 . \end{cases} \quad (5.19)$$

Wird die Schrödingergleichung in einem kleinen Intervall $[-\epsilon, \epsilon]$ ($\epsilon > 0$) integriert

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \left(-\frac{d^2}{dz^2} + v(z) - \beta \delta(z) \right) \psi(z) dz = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} E \psi(z) dz, \quad (5.20)$$

so folgt

$$-\left(\frac{d}{dz} \psi_r(\epsilon) - \frac{d}{dz} \psi_l(-\epsilon) \right) + \underbrace{\int_{-\epsilon}^{\epsilon} v(z) \psi(z) dz}_{\rightarrow 0} - \beta \psi(0) = E \underbrace{\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(z) dz}_{\rightarrow 0}. \quad (5.21)$$

Da $v(z)$ und $\psi(z)$ bei $z = 0$ höchstens eine endliche Unstetigkeitsstelle besitzen, verschwinden die markierten Terme im Grenzfalle $\epsilon \rightarrow 0^+$. Somit wirkt sich die δ Funktion auf die Anpassungsbedingungen der Ableitung der Wellenfunktionen aus: Die Wellenfunktion ψ muss an der Grenzfläche stetig sein, aber die Ableitung $d\psi/dz$ besitzt eine Unstetigkeit von der Stärke des attraktiven δ Potentials (β) multipliziert mit der Amplitude der Wellenfunktion an dieser Stelle. Somit lauten die Anpassungsbedingungen an der Grenzfläche im dreidimensionalen Fall bei einem Potential $v(\mathbf{r}) - \beta\delta(z)$

$$\lim_{z \rightarrow 0^-} \psi_l(\mathbf{r}) = \lim_{z \rightarrow 0^+} \psi_r(\mathbf{r}) \quad (5.22)$$

$$\lim_{z \rightarrow 0^-} \frac{\partial}{\partial z} \psi_l(\mathbf{r}) - \lim_{z \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial z} \psi_r(\mathbf{r}) = \beta \lim_{z \rightarrow 0^-} \psi_l(\mathbf{r}). \quad (5.23)$$

Für den Fall, dass $\beta = 0$ ist, wird aus (5.23) die gewöhnliche Anpassungsbedingung, dass die Ableitung der Wellenfunktion stetig sein muss. In unserem Modell können mit Hilfe des β Parameters Grenzflächenzustände ein- ($\beta > 0$) und ausgeschaltet ($\beta = 0$) werden.

Anpassen der Wellenfunktionen

Sind die allgemeinen Lösungen in den drei Bereichen bestimmt worden, so ergeben sich die Lösungen der gesamten Struktur durch Anpassen der Wellenfunktionen an den Grenzflächen gemäß den Gleichungen (5.22) und (5.23). Es wird angenommen, dass eine Welle $\psi_{k_z, \mathbf{k}_{\parallel}}^{\nu, \text{ein}}$ von links auf die Tunnelbarriere einläuft, dort teilweise nach links wieder reflektiert $\psi_{-k_z'', \mathbf{k}_{\parallel}}^{\nu'', \text{refl}}$ oder in eine nach rechts auslaufende Welle transmittiert wird $\psi_{k_z', \mathbf{k}_{\parallel}}^{\nu', \text{aus}}(\mathbf{r})$.

Die Anpassungskoeffizienten sind die Amplituden $r_{\nu\nu'}$ der reflektierten Wellen, die Randbedingungen der Wellenfunktionen in der Barriere a' und b' (5.16) jeweils für die linke und die rechte Grenzfläche und die Amplituden $t_{\nu\nu'}$ der nach rechts transmittierten Wellen. Da hier neun Bänder vorliegen ($\nu = 1, \dots, 9$) besitzen die obigen Matrizen $9 \times 9 = 81$ Matrixelemente. Die Matrix $t_{\nu\nu'}$ beschreibt die Transmissionsamplitude einer einlaufenden Welle im Band ν in eine auslaufende Wellen im Band ν' und analog für die Reflektionsamplituden $r_{\nu\nu'}$. Mit den zwei Anpassungsbedingungen (5.22) und (5.23) an den beiden Grenzflächen müssen $4 \times 81 = 324$ Gleichungen gelöst werden. Da von links Wellen auf die Barriere einlaufen, muss ein inhomogenes Gleichungssystem gelöst werden.

Berechnung des Leitwertes

Der Leitwert wird über die Landauer-Büttiker Formel (4.10) berechnet. Da hier mehrere Bänder in den Elektroden am Stromtransport teilnehmen können, muss die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $J_{\mathbf{k}}^\nu$ in z Richtung pro zweidimensionale Einheitszelle des jeweiligen Bandes berücksichtigt werden. Diese beträgt (in atomaren Einheiten)

$$J_{\mathbf{k}}^\nu = \frac{1}{A_{\text{WS}}} \int_{A_{\text{WS}}} j_{\mathbf{k}}^\nu(x, y) dx dy, \quad \text{mit} \quad (5.24)$$

$$j_{\mathbf{k}}^\nu(x, y) = -i \left(\psi_{\mathbf{k}}^{\nu*}(\mathbf{r}) \nabla_z \psi_{\mathbf{k}}^\nu(\mathbf{r}) - \psi_{\mathbf{k}}^\nu(\mathbf{r}) \nabla_z \psi_{\mathbf{k}}^{\nu*}(\mathbf{r}) \right), \quad (5.25)$$

wobei A_{WS} die Fläche der zweidimensionalen Einheitszelle ist. Wird die Lösung der Wellenfunktion in den Elektroden (5.15) eingesetzt, so vereinfacht sich der Ausdruck aufgrund der Normierung (5.14)

$$J_{\mathbf{k}}^\nu = \frac{1}{A_{\text{WS}}} \int_{-\frac{a_x}{2}}^{\frac{a_x}{2}} \int_{-\frac{a_y}{2}}^{\frac{a_y}{2}} 2 \operatorname{Re}(k_z^\nu) \frac{\left| \sum_{i=1}^9 c_{n_i}^\nu(\mathbf{k}_{\parallel}) e^{i(k_x + n_x g_x)x} e^{i(k_y + n_y g_y)y} \right|^2}{\sum_{i=1}^9 \left| c_{n_i}^\nu(\mathbf{k}_{\parallel}) \right|^2} dy dx \quad (5.26)$$

$$= 2 \operatorname{Re}(k_z^\nu). \quad (5.27)$$

Für den Stromtransport werden nur Bänder mit reellen k_z^ν betrachtet, da Bänder mit einem imaginären k_z^ν in den Elektroden exponentiell abfallen und keinen Strom transportieren können. Mit den auf die Stromdichte normierten Transmissionswahrscheinlichkeiten

$$T_{\nu\nu'} = \frac{k_z^{\nu'}}{k_z^\nu} |t_{\nu\nu'}|^2 \quad (5.28)$$

und der Landauer-Büttiker Formel (4.10) lässt sich der Leitwert G berechnen

$$G = 2 \frac{e^2}{h} \sum_{\nu, \nu'=1}^9 T_{\nu\nu'}. \quad (5.29)$$

Da im analytischen Modell nur der spinunabhängige Fall betrachtet wird, ist die Spinartung durch den Faktor 2 berücksichtigt.

5.2.2 Zweidimensionales Modell mit senkrechtem Einfall

Es werden nun die Ergebnisse des analytischen Modells diskutiert. Dabei wird zunächst der einfache Fall betrachtet, dass die Elektronen senkrecht auf die Tunnelbarriere auftreffen, d.h. $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$. Dafür wird die Transmission in Abhängigkeit der Energie diskutiert. Obwohl für den Leitwert bzw. den Stromtransport nur die Eigenschaften an der Fermienergie relevant sind (siehe z.B. die *ab initio* Co/Vakuum/Co(001) Rechnungen), werden im zweidimensionalen, analytischen Modell die *Hot Spots* energieabhängig berechnet. Dies wird gegenüber einer \mathbf{k}_{\parallel} Abhängigkeit bevorzugt, weil sich so die Diskussion einfacher gestaltet. Die hierbei gefundenen Eigenschaften lassen sich aber auf den Leitwert bei einer konstanten Energie und in Abhängigkeit von \mathbf{k}_{\parallel} übertragen, da die Hot Spots in einem kleinen Bereich in der 2DBZ lokalisiert sind. Um die Äquivalenz beider Betrachtungen, der Transmission bei einem konstanten \mathbf{k}_{\parallel} Vektor und der Leitwert bei einer konstanten Energie, zu verdeutlichen, wird die Energie bis zum linearen Term in eine Taylor Reihe entwickelt

$$E(\mathbf{k}_{\parallel}, k_z) = E(\mathbf{k}_{\parallel}^0, k_z^0) + \partial_{k_z} E(\mathbf{k}_{\parallel}^0, k_z^0) \Delta k_z + \partial_{\mathbf{k}_{\parallel}} E(\mathbf{k}_{\parallel}^0, k_z^0) \cdot \Delta \mathbf{k}_{\parallel} + \dots \quad (5.30)$$

Im zweidimensionalen, analytischen Modell wird durch Variation der Energie E (Gleichung (5.31)) bei konstantem \mathbf{k}_{\parallel} und in *ab initio* Rechnungen durch Variation des \mathbf{k}_{\parallel} Vektors an der Fermienergie E_F (Gleichung (5.32)) die k_z Komponente durchgeföhren, bis die Resonanzbedingung Δk_z der Hot Spots erfüllt ist

$$\text{2D Modell :} \quad \Delta k_z = \frac{E - E(\mathbf{k}_{\parallel}^0, k_z^0) - \overbrace{\partial_{\mathbf{k}_{\parallel}} E(\mathbf{k}_{\parallel}^0, k_z^0) \cdot \Delta \mathbf{k}_{\parallel}}^{=0}}{\partial_{k_z} E(\mathbf{k}_{\parallel}^0, k_z^0)} \quad (5.31)$$

$$\text{Ab initio :} \quad \Delta k_z = \frac{\overbrace{E_F - E(\mathbf{k}_{\parallel}^0, k_z^0) - \partial_{\mathbf{k}_{\parallel}} E(\mathbf{k}_{\parallel}^0, k_z^0) \cdot \Delta \mathbf{k}_{\parallel}}^{=0}}{\partial_{k_z} E(\mathbf{k}_{\parallel}^0, k_z^0)}. \quad (5.32)$$

Anschaulich wird dieser Sachverhalt in Abbildung 5.6 gezeigt, in der zwei Flächen konstanter Energie im reziproken Raum schematisch dargestellt sind. Die Punkte stellen die Leitwerte bzw. Transmissionen aus dem zweidimensionalen, analytischen Modell durch Variation der Energie und aus den *ab initio* Rechnungen durch Variation des \mathbf{k}_{\parallel} Vektors dar.

Da hier nur der senkrechte Einfall untersucht werden soll, wird $k_x = k_y = 0$ bzw. $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ gesetzt. In Abbildung 5.6 entspricht das dem Spezialfall $\mathbf{k}_{\parallel}^0 = 0$. Zusätzlich wird nur eine Variation des Kristallpotentials in x Richtung angenommen, da dies für die Erklärung der Hot Spots ausreichend ist: $V_{n_x, n_y} = 0$ für $n_y \neq 0$. Es werden folgende Abkürzungen benutzt: $V_{g_x} = V_g$ und $g_x = g$. Somit lautet das Kristallpotential $V(x) = 2V_g \cos gx$. Damit vereinfachen sich die obigen Gleichungen erheblich. Sofern nichts anderes angemerkt ist, sind im analytischen Modell die in Tabelle 5.1 aufgelisteten Parameter verwendet worden. Dabei wurde versucht, solche Parameter zu verwenden, die "realistische" Ergebnisse liefern. Dies ist allerdings aufgrund der Einfachheit des Modells nicht immer möglich.

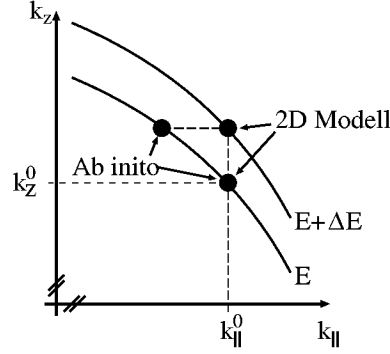


Abbildung 5.6: Schematische Darstellung zweier Flächen konstanter Energie im reziproken Raum. Damit wird anschaulich der Unterschied zwischen der Transmission in Abhängigkeit der Energie bei einem konstanten $\mathbf{k}_{||}$ Vektor des zweidimensionalen, analytischen Modells (“2D Modell”) und des Leitwertes in Abhängigkeit des $\mathbf{k}_{||}$ Vektors bei einer konstanten Energie in den *ab initio* Rechnungen (“Ab initio”) dargestellt.

Name	Bedeutung	Größe	Einheit
V_B	Höhe der Potentialbarriere	1.2	Ryd
g	Reziproker Gittervektor	1	a.u. ⁻¹
V_0	Mittleres Kristallpotential	0	
V_g	1. Fourierkoeffizient des Kristallpotentials	-0.05	Ryd
β	Bindungsstärke des Grenzflächenzustandes	1.3	a.u. Ryd
D	Barrierendicke	1. . . 20	a.u.

Tabelle 5.1: Verwendete Parameter in dem analytischen Modell für senkrechten Einfall und einem Kristallpotential nur in x Richtung.

Bandstruktur in den Elektroden

Zunächst wird ein verschwindendes Kristallpotential (freie Elektronen im Kristall) betrachtet, d.h. $V_g = 0$. In diesem Fall liegen zwei Bänder in den Bulk-Elektroden vor

$$E^1 = k_z^2 \quad \psi_{k_z}^1(z) = e^{ik_z z} \quad (5.33)$$

$$E^{2,3} = k_z^2 + g^2 \quad \psi_{k_z}^2(x, z) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ik_z z} 2 \cos gx \quad (5.34)$$

$$\psi_{k_z}^3(x, z) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ik_z z} 2 \sin gx. \quad (5.35)$$

Dabei ist das energetisch höhere Band um g^2 verschoben und zweifach entartet. Nun wird ein kleines Kristallpotential V_g angenommen, wobei “klein” bedeutet

$$\alpha = \frac{2V_g}{g^2} \ll 1. \quad (5.36)$$

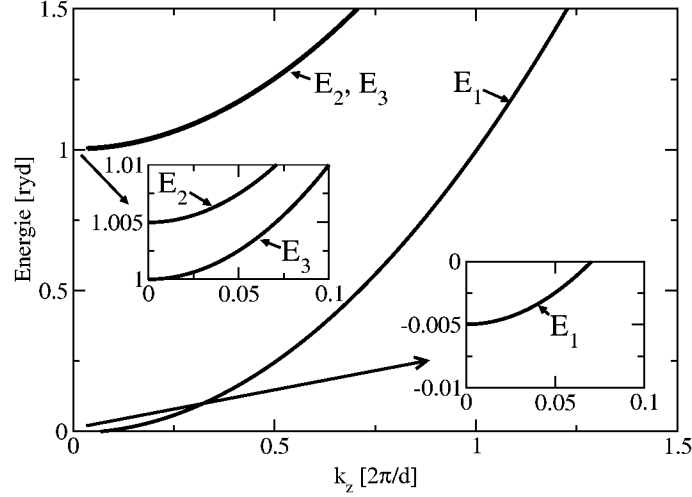


Abbildung 5.7: Bandstruktur in den Elektroden bei $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ und einem kleinen Kristallpotential $V_g = -0.05$ Ryd. Die kleinen Diagramme zeigen die Bandminima vergrößert.

Diese Annahme ist bei den hier gewählten Parametern ausreichend erfüllt: $\alpha = 0.1$. Mit dieser Näherung können die Bandstrukturen und Wellenfunktionen analytisch angegeben werden. Wie in Störungstheorie üblich werden die Energien bis α^2 und die Wellenfunktionen bis α entwickelt.

$$E_1 = k_z^2 - \frac{g^2 \alpha^2}{2} \quad \psi_{k_z}^1(x, z) = e^{ik_z z} (1 - \alpha \cos gx) \quad (5.37)$$

$$E_2 = k_z^2 + g^2 + \frac{g^2 \alpha^2}{2} \quad \psi_{k_z}^2(x, z) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ik_z z} (\alpha + 2 \cos gx) \quad (5.38)$$

$$E_3 = k_z^2 + g^2 \quad \psi_{k_z}^3(x, z) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ik_z z} 2 \sin gx. \quad (5.39)$$

Mit den verwendeten Parametern ergibt sich $g^2 \alpha^2 / 2 = 0.005$ Ryd. Durch das Kristallpotential werden alle geraden Wellenfunktionen, d.h. symmetrisch zur z -Achse, leicht mit der jeweils anderen geraden Wellenfunktion über den Kopplungsparameter α miteinander gemischt. Diese Bänder werden ebenfalls energetisch nach oben bzw. nach unten verschoben. Die ungerade Wellenfunktion $\psi_{k_z}^3$ bleibt unverändert, da sie nicht an das gerade Kristallpotential koppeln kann. Einem verschwindenden Kristallpotential entsprechen entkoppelte Bänder ($\alpha \rightarrow 0$). Die numerisch berechneten Bandstrukturen sind in Abbildung 5.7 dargestellt. Die beiden kleinen Diagramme zeigen die Bandminima bei $k_z = 0$ vergrößert. Darin erkennt man, dass die in Störungstheorie erhaltene analytische Lösung mit der numerisch bestimmten sehr gut übereinstimmt.

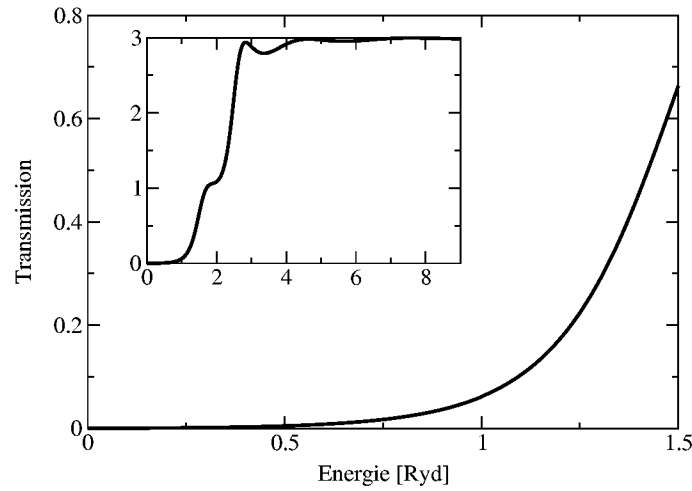


Abbildung 5.8: Transmission durch eine 4 a.u. dicke und 1.2 Ryd hohe Potentialbarriere ohne Grenzflächenzustände. Das kleinere Diagramm zeigt die Transmission über einen größeren Energiebereich bis 9 Ryd.

Tunnelbarriere ohne Grenzflächenzustände

Zunächst soll die Transmission ohne Grenzflächenzustände diskutiert werden. Diese ist in Abbildung 5.8 für eine 4 a.u. dicke Potentialbarriere gezeichnet. In dem kleineren Graphen ist die Transmission bis zu einer Energie von 9 Ryd abgebildet. Hier ist besonders der Energiebereich unterhalb der beiden oberen Bänder im Bereich von 0.9...1 Ryd von Interesse, da dort, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, die Resonanzzustände liegen werden. Für Energien niedriger als die Barrierenhöhe wird das erwartete exponentielle Ansteigen der Transmission sichtbar. In dem hier wichtigen Energiebereich unterhalb von 1 Ryd ist die Transmission kleiner als 0.1. In dem kleineren Graphen ist das bekannte oszillatorische Verhalten für Energien oberhalb einer Potentialbarriere erkennbar. Da oberhalb von etwa 1 Ryd zusätzlich die beiden oberen Bänder vorhanden sind, steigt die Transmission bis auf 3. Der Anstieg bei etwa 2 Ryd kommt von der effektiv höheren Potentialbarriere für die oberen Bänder (siehe Gleichung (5.17)): $V_{\text{eff}} \cong V_B + g^2 = 2.2$ Ryd.

In Abbildung 5.9 ist die Wellenfunktion (Real-, Imaginär- und Absolutteil) für eine Energie von 0.95 Ryd dargestellt. In der Barriere ist das exponentielle Abfallen der Aufenthaltswahrscheinlichkeit erkennbar. In der linken Elektrode ergibt sich durch die Interferenz zwischen einlaufender und reflektierter Welle ein oszillierender Absolutteil. In der rechten Elektrode gibt es eine kleine, exponentiell abklingende Oszillation (siehe kleines Diagramm in Abbildung 5.9), die durch Überlagerung mit dem exponentiell abklingenden, oberen Band entsteht. Wie weiter oben gezeigt wurde, wird das untere Band über die Kopplung α leicht mit dem oberen Band gemischt, das aber bei 0.95 Ryd keine propagierenden Zustände besitzt. Für entkoppelte Bänder ($\alpha = 0$) verschwinden diese kleinen Oszillationen.

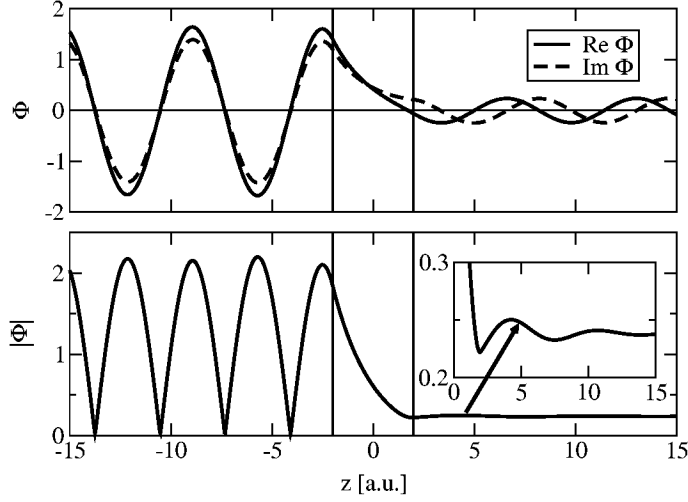


Abbildung 5.9: Real-, Imaginärteil (oben) und Absolutteil (unten) der Wellenfunktion bei einer 4 a.u. dicken Barriere (markiert durch senkrechte Linien) ohne Grenzflächenzustände. Das kleine Diagramm im unteren Bild zeigt die Oszillationen in der rechten Elektrode vergrößert (siehe Text). Die Energie beträgt 0.95 Ryd.

Tunnelbarriere mit einem Grenzflächenzustand

Nun wird an der linken Grenzfläche ein Grenzflächenzustand erzeugt, indem $\beta_1 = 1.3$ a.u. Ryd und $\beta_2 = 0$ gesetzt wird. Der Effekt des δ förmigen Potentials soll zunächst in analytischer Form mit Hilfe eines einfachen Beispiels diskutiert werden. Dazu werden die gebundenen Zustände ($E < 0$) für das Potential

$$V(z) = -\beta \delta(z) + \begin{cases} V_B & , z > 0 \\ 0 & , z < 0 \end{cases}$$

bestimmt. Dies entspricht dem Potentialverlauf an der linken Grenzfläche für das energetisch tiefere Band mit einer unendlich dicken Barriere der Höhe V_B . Die gebundenen Lösungen in den beiden Halbräumen lauten

$$z < 0 : \quad \phi^1(z) = e^{\kappa_1 z} \quad \kappa_1 = \sqrt{-E} \quad (5.40)$$

$$z > 0 : \quad \phi^2(z) = e^{-\kappa_2 z} \quad \kappa_2 = \sqrt{V_B - E}. \quad (5.41)$$

Mit den Anpassungsbedingungen (5.22) und (5.23) bei $z = 0$ ergibt sich ein gebundener Zustand mit einer Energie von

$$E_R = -\frac{\beta^2}{4} \left(1 - \frac{V_B}{\beta^2} \right), \quad (5.42)$$

wobei gelten muss $\beta > 0$ und $\beta^2 > V_B$. Das heißt, dass nur für $\beta^2 > V_B$ ein Grenzflächenzustand erzeugt wird (hier $\beta > \sqrt{V_B} \cong 1.10$ a.u. Ryd). Ansonsten ist das Grenzflächenpotential nicht "tief" genug. Dieses Verhalten stimmt mit den numerischen Ergebnissen des

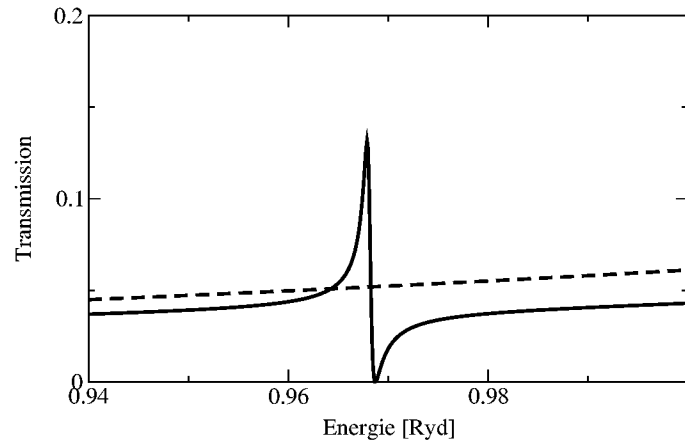


Abbildung 5.10: Transmission durch eine 4 a.u. dicken Barriere mit einem Grenzflächenzustand bei $z = -D/2$ der Stärke $\beta = 1.3$ a.u. Ryd. Zum Vergleich ist die Transmission ohne Grenzflächenzustand gestrichelt eingezeichnet.

Modells überein. Mit den hier verwendeten Parametern aus Tabelle 5.1 wird ein gebundener Zustand bei etwa $E_R = -0.0355$ Ryd jeweils unterhalb des Bandminimums erwartet. Der Grenzflächenzustand unterhalb des unteren Bandes ist lokalisiert, da für diese Energien keine propagierenden Zustände in den Elektroden vorhanden sind. Der Zustand unterhalb des oberen Bandes dagegen kann über die Kopplung α an das untere Band resonant ankoppeln, da an der Grenzfläche die Translationssymmetrie in z Richtung gebrochen ist und so die k_z Komponente keine Erhaltungsgröße ist. In den Bulk Elektroden dagegen sind beide Bänder orthogonal zueinander. Daher wird also ein resonanter Zustand bei der Energie $E = 1.005$ Ryd $- 0.0355$ Ryd $= 0.970$ Ryd erwartet. In Abbildung 5.10 ist die berechnete Transmission für Energien unterhalb des oberen Bandes dargestellt. An der erwarteten Resonanzenergie ist deutlich ein Maximum in der Transmission erkennbar. Die kleine Abweichung der Resonanzenergie von dem einfachen analytischen Ergebnis kommt sowohl von der endlichen Barrierendicke, wodurch der Grenzflächenzustand effektiv eine niedrigere Potentialbarriere sieht, als auch durch die Kopplung beider Bänder. Die Wellenfunktion an der Resonanzenergie ist in Abbildung 5.11 dargestellt. Deutlich ist ein hohes Maximum der Wahrscheinlichkeitsamplitude an der linken Grenzfläche erkennbar, wo der Grenzflächenzustand erzeugt wurde. Damit kann das Transmissionsmaximum durch die erhöhte Wahrscheinlichkeitsamplitude an der linken Grenzfläche erklärt werden, wodurch die Elektronen die Barriere verstärkt durchtunneln. Dieser Effekt wird im Folgenden “verstärktes Tunneln” genannt. In der rechten Elektrode sind die exponentiell gedämpften Oszillationen durch das obere Band zu beobachten. Durch die hohe Intensität an der linken Grenzfläche sind die Oszillationen größer als ohne Grenzflächenzustand (siehe Abbildung 5.9). Die Hot Spots werden allerdings nicht von diesem Effekt hervorgerufen, da diese Resonanzen selbst bei kleinen Barrierendicken keine volle Transmission zeigen. Vielmehr entspricht dieser Effekt in den *ab initio* Rechnungen der antiparallelen Ausrichtung der magnetischen Momente

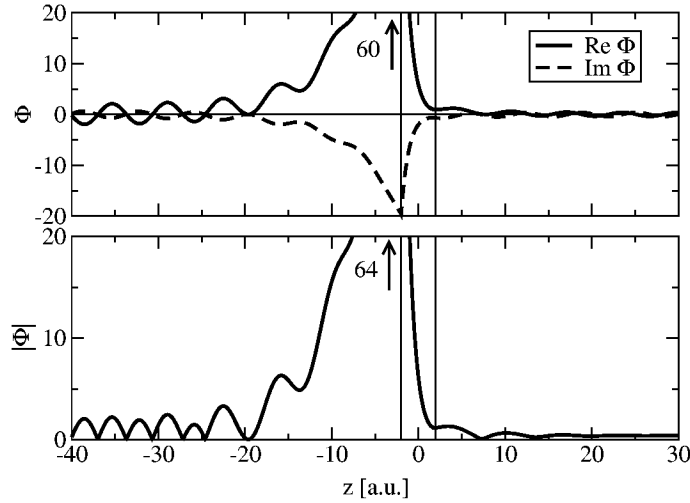


Abbildung 5.11: Real-, Imaginärteil (oben) und Absolutteil (unten) der Wellenfunktion bei einer 4 a.u. dicken Barriere (markiert durch senkrechte Linien) und einem Grenzflächenzustand bei $z = -D/2$ der Stärke $\beta = 1.3$ a.u. Ryd. Die Energie liegt im Transmissionsmaximum der Resonanz.

in den ferromagnetischen Elektroden, da in diesem Fall die Elektronen mit einer festen Spinrichtung nur an einer Barrierenseite Grenzflächenzustände sehen.

Weiter ist in Abbildung 5.10 bei einer etwas höheren Energie eine Antiresonanz mit verschwindender Transmissionswahrscheinlichkeit zu erkennen. Diese kann mit dem Fano-Effekt [89] erklärt werden, d.h. eine lokalisierte Resonanz auf einem kontinuierlichen Streuspektrum. Dieses wird bei der Diskussion der Streuphasen weiter unten deutlicher.

Für den Fall, dass die beiden Bänder entkoppelt sind, d.h. bei $\alpha = 0$, ist auch der obere Grenzflächenzustand lokalisiert, da er dann nicht mehr an das untere Band ankoppeln kann. Das entspricht einer verschwindenden Resonanzbreite. Die Kopplung und somit die Resonanzbreite der beiden Bänder ist proportional zum Quadrat der Kopplungsstärke, was in Abbildung 5.12 dargestellt ist. Bei einer Variation von α verschiebt sich zusätzlich die Resonanzenergie, hauptsächlich weil das Minimum des oberen Bandes ebenfalls von α^2 abhängt (siehe Gleichung (5.38)).

Hiermit kann bereits die Frage beantwortet werden, warum die Hot Spots in *ab initio* Rechnungen nur im Minoritätsband auftreten: In den bekannten Fällen ist die Fermifläche für Majoritätselektronen eine einfache Fläche, d.h. es steht nur ein Band an der Fermienergie zur Verfügung. Somit sind alle Grenzflächenzustände lokalisiert, da kein zweites Band existiert, an das sie resonant ankoppeln können. Dies entspricht dem Grenzflächenzustand unterhalb des unteren Bandes im analytischen Modell. Dagegen existieren im Minoritätsband mehrere Fermiflächen, so dass die Grenzflächenzustände resonant an andere propagierende Zustände in den Elektroden ankoppeln können. Letzteres entspricht dem resonanten Zustand unterhalb des oberen Bandes im analytischen Modell.

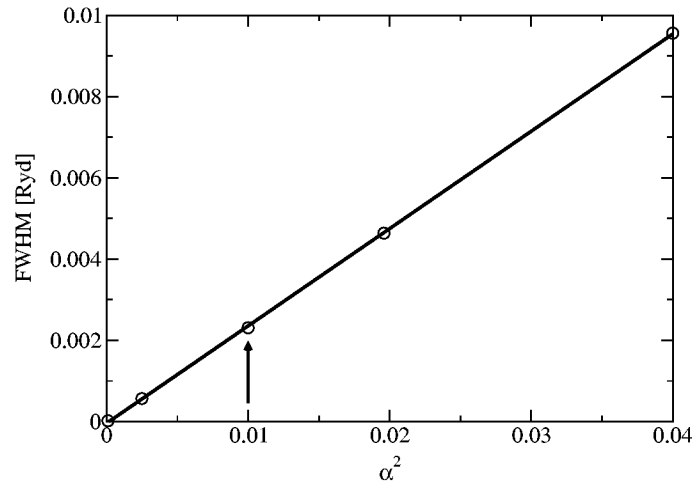


Abbildung 5.12: Halbwertsbreite (FWHM, *Full Width at Half Maximum*) des Resonanzzustandes unterhalb des oberen Bandes in Abhängigkeit des Quadrates des Kopplungsparameters $\alpha = 2V_g/g^2$. Die Linie stellt eine lineare Anpassung an die Punkte dar (FWHM = $0.237 \text{ Ryd } \alpha^2$). Der hier verwendete Wert für $\alpha = 0.1$ ist durch einen Pfeil gekennzeichnet.

Tunnelbarriere mit zwei identischen Grenzflächenzuständen

Existieren zwei identische Grenzflächenzustände an beiden Grenzflächen, d.h. $\beta_1 = \beta_2 = 1.3$ a.u. Ryd, so können diese in der Tunnelbarriere miteinander wechselwirken. Dieser Fall ähnelt qualitativ dem eines Wasserstoffmoleküls, da die Resonanzen in der Barriere bindende und antibindende Orbitale bilden und so die Resonanzzustände symmetrisch aufspalten. Die berechnete Transmission für eine 4 a.u. dicke Barriere ist in Abbildung 5.13 dargestellt. Zum Vergleich ist die Transmission mit nur einem Grenzflächenzustand gestrichelt eingezeichnet. Beide Resonanzen werden symmetrisch in zwei Zustände aufgespalten. Die maximale Transmission ist jeweils 1, d.h. die Elektronen durchqueren die Potentialbarriere ohne Intensitätsverlust. Dies ist derselbe Effekt wie er bei den Hot Spots in *ab initio* Rechnungen beobachtet wird. Neben den Resonanzen ist jeweils eine Antiresonanz mit verschwindender Transmission vorhanden (siehe vergrößerter Ausschnitt in Abbildung 5.13). Die Wellenfunktionen an beiden Resonanzen sind in Abbildung 5.14 abgebildet. Im oberen Bild ist der bindende Zustand an der energetisch tiefer liegenden und im unteren der antibindende Zustand an der höheren Resonanzenergie dargestellt. Durch die höhere Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen den Grenzflächen im bindenden Zustand liegt dieser wie beim Wasserstoffmolekül energetisch tiefer als der antibindende. Der bindende Zustand besitzt eine nahezu gerade und der antibindende eine nahezu ungerade Symmetrie. Sie kann nicht vollkommen sein, da die von links einlaufende Welle die Symmetrie bricht. Da dessen Amplitude allerdings viel kleiner als die des bindenden und antibindenden Orbitals ist, wird von einer fast perfekten Symmetrie gesprochen. Damit kann die volle Transmission durch die Resonanzen qualitativ erklärt werden, denn die Amplitude des ge-

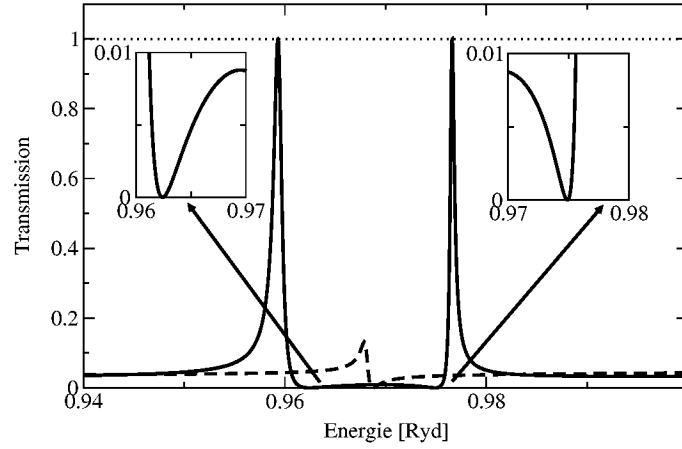


Abbildung 5.13: Transmission durch eine 4 a.u. dicke Barriere mit zwei identischen Grenzflächenzuständen bei $z = \pm D/2$ der Stärke $\beta = 1.3$ a.u. Ryd (durchgezogene Linie). Zum Vergleich ist die Transmission mit einem Grenzflächenzustand aus Abbildung 5.10 (gestrichelte Linie) eingezeichnet. Der Bereich um die beiden Antiresonanzen ist vergrößert dargestellt.

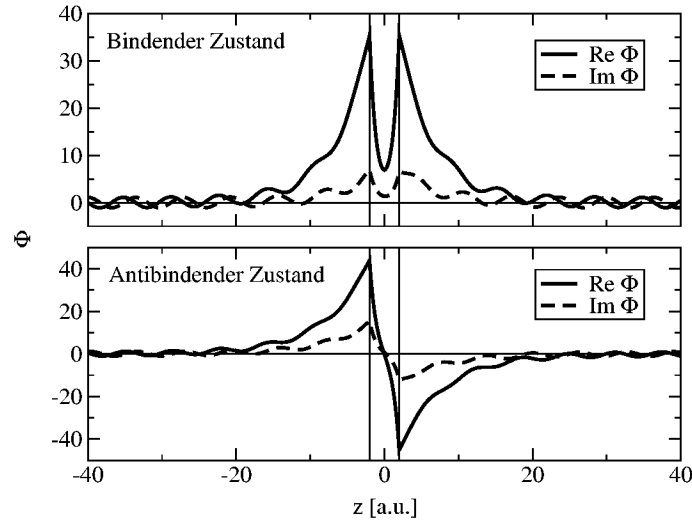


Abbildung 5.14: Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion am linken Transmissionsmaximum (Bindender Zustand, oben) und am rechten Maximum (Antibindender Zustand, unten) für eine 4 a.u. dicke Barriere mit zwei identischen Grenzflächenzuständen bei $z = \pm D/2$ der Stärke $\beta = 1.3$ a.u. Ryd. Die Barriere ist durch senkrechte Linien angedeutet.

samen Zustands muss auf beiden Seiten der Barriere aus Symmetriegründen (fast) gleich sein.

Die volle Transmission kann auch in einem zeitabhängigen Bild verstanden werden. Durch die Hybridisierung der beiden Resonanzen in bindende und antibindende Zustände können die Elektronen in diesen Orbitalen kohärent von der einen Grenzfläche zur anderen und wieder zurück hüpfen. Daher wird der Effekt im Folgenden auch “volle Transmission durch resonantes Hüpfen” genannt. Es sei $|L\rangle$ der Grenzflächenzustand an der linken und $|R\rangle$ der an der rechten Grenzfläche. Mit der Annahme, dass sich die Grenzflächenorbitale beim Hybridisieren nicht stark ändern, kann hieraus der bindende $|B\rangle$ und antibindende $|A\rangle$ Zustand gebildet werden

$$|B\rangle \cong \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle) \quad (5.43)$$

$$|A\rangle \cong \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle). \quad (5.44)$$

Die zugehörigen Energieeigenwerte seien E_B und E_A für das bindende und das antibindende Hybrid. Somit kann das zeitliche Verhalten nach diesen Basisfunktionen entwickelt werden

$$|\Psi(t)\rangle = c_B e^{-\frac{i}{\hbar} E_B t} |B\rangle + c_A e^{-\frac{i}{\hbar} E_A t} |A\rangle. \quad (5.45)$$

Die Anfangsbedingung sei $|\Psi(0)\rangle = |L\rangle$, d.h. das Elektron befindet sich im linken Grenzflächenzustand. Daraus ergibt sich für die zeitabhängige Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons

$$\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle L|L\rangle \cos^2 \frac{\Delta}{2\hbar} t + \langle R|R\rangle \sin^2 \frac{\Delta}{2\hbar} t, \quad (5.46)$$

wobei $\Delta = E_A - E_B$ die Aufspaltung des bindenden und antibindenden Zustands ist. Das bedeutet, dass sich das Elektron nach $\frac{\Delta}{2\hbar} t_H = \frac{\pi}{2}$ vollständig an der rechten Grenzfläche befindet. Damit beträgt die Hüpfzeit

$$t_H = \frac{\pi\hbar}{\Delta}. \quad (5.47)$$

Je größer also die Aufspaltung, desto öfters hüpfen die Elektronen pro Zeiteinheit von einer zur anderen Grenzfläche kohärent hin und her. Damit ist es qualitativ verständlich, warum die Elektronen nicht an Intensität verlieren, da sie ohne zu tunneln in den Orbitalen auf die andere Seite kohärent hüpfen können. Allerdings verweilen die Elektronen nur eine endliche Zeit in den Resonanzen, da sie durch die Kopplung α auch in das untere Band übergehen können. Die Lebensdauer der Resonanz kann aus der Halbwertsbreite Γ der Resonanzen bestimmt werden: $t_R = \hbar/\Gamma$. Bei einer starken Kopplung, d.h. bei einem großen α , gehen die Elektronen schneller in das untere Band. Ist nun die Lebensdauer der Resonanzen länger als die Hüpfzeit $t_R > t_H$, bzw. die Aufspaltung der Resonanzen größer als die Halbwertsbreite $\Delta > \Gamma$, so können die Elektronen mehrmals zur anderen Grenzfläche hüpfen und müssen nicht durch die Barriere tunneln. Ist dagegen die Lebensdauer kürzer als die Hüpfzeit $t_R < t_H$, bzw. sind die beiden Resonanzmaxima bereits miteinander verschmolzen $\Delta < \Gamma$, so wird der Hüpfprozess immer unwahrscheinlicher, und die Transmission der Elektronen wird aufgrund des Tunnelprozesses stark reduziert. Dieses wird “Übergang zum verstärkten

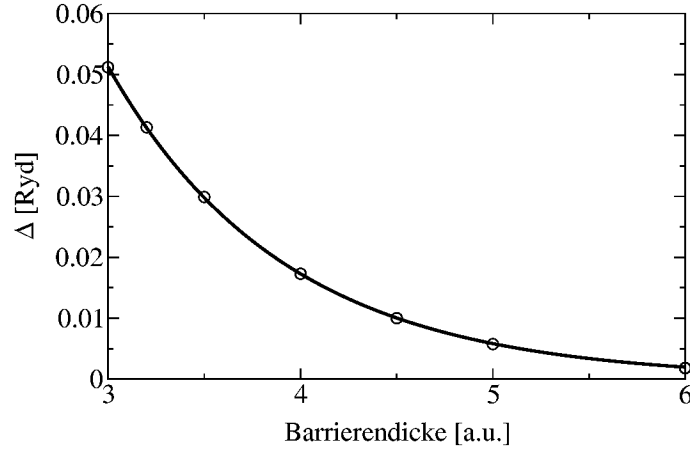


Abbildung 5.15: Aufspaltung Δ des bindenden und des antibindenden Zustandes bei zwei identischen Grenzflächenzuständen der Stärke $\beta = 1.3$ a.u. Ryd in Abhängigkeit der Barrierendicke. Die Linie gibt eine Anpassung an die berechneten Werte.

Tunneln” genannt. Ist die Lebensdauer viel kürzer als die Hüpfzeit $t_R \ll t_H$, so kann der Hüpfprozess vernachlässigt werden, und es liegt nur eine verstärkte Transmission wie bei nur einem Grenzflächenzustand vor.

Die Lebensdauer der Resonanzen wird durch die Kopplung α variiert, wohingegen der Überlapp der Resonanzen und somit die Aufspaltung des bindenden und des antibindenden Zustandes von der Barrierendicke D abhängt. Da die Resonanzen zum oberen Band gehören, werden sie in der Barriere für Energien im Bereich zwischen 0.9...1.0 Ryd mit der Dämpfungskonstante (5.17) $\kappa = \sqrt{V_B + g^2 - E} = 1.14 \dots 1.10$ a.u.⁻¹ exponentiell gedämpft. Damit hängt die Amplitude der Resonanz an der anderen Grenzfläche wie $e^{-\kappa D}$ von der Barrierendicke ab. In Abbildung 5.15 ist die Aufspaltung des bindenden und des antibindenden Zustandes in Abhängigkeit der Barrierendicke dargestellt. Die Linie ist eine Anpassung an die numerischen Werte (Punkte): $\Delta \propto e^{-1.10 \text{ a.u.}^{-1} D}$. In dem betrachteten Energiebereich zeigt die Aufspaltung das erwartete Abfallverhalten für das obere Band mit einer Dämpfungskonstanten von $\kappa = 1.10 \text{ a.u.}^{-1}$.

In Abbildung 5.16 ist die Transmission für eine 8 a.u. dicke Barriere abgebildet. Für diese Barrierendicke ist der Überlapp beider Grenzflächenresonanzen so klein geworden, dass die Aufspaltung des bindenden und antibindenden Zustandes kleiner als die Resonanzbreite geworden ist. Deshalb ist nur noch eine Resonanz in der Transmission erkennbar, die auch keine volle Transmission mehr aufweist. Dies ist der Fall, bei der die Resonanzlebensdauer kürzer als die Hüpfzeit ist, so dass der Hüpfprozess unwahrscheinlich geworden, aber noch nicht komplett ausgeklungen ist. Dieser Effekt des Übergangs zum verstärkten Tunneln ist wichtig zum Verständnis, warum die Hot Spots den integrierten Leitwert bis zu einer bestimmten Barrierendicke bestimmen. Wie in dem kleineren Diagramm eingezeichnet, ist die Transmission durch den Tunnelprozess für Energien etwas von der Resonanz entfernt drei Größenordnungen kleiner als durch die Resonanz.

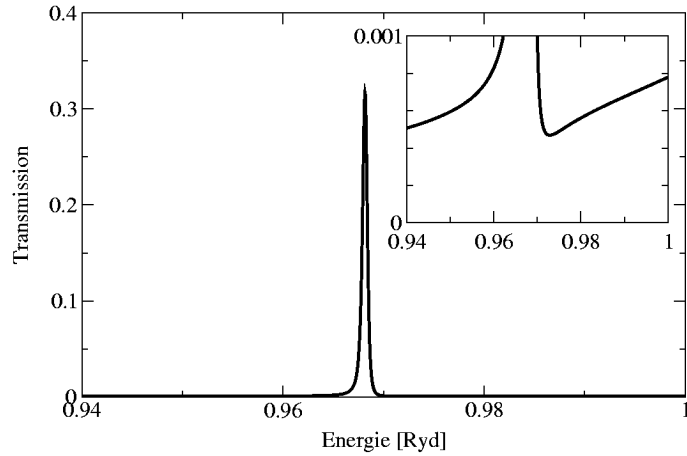


Abbildung 5.16: Transmission durch eine 8 a.u. dicke Barriere mit zwei identischen Grenzflächenzuständen bei $z = \pm D/2$ der Stärke $\beta = 1.3$ a.u. Ryd. Im kleinen Diagramm ist der niedrige Leitwert durch den normalen Tunnelprozess vergrößert dargestellt.

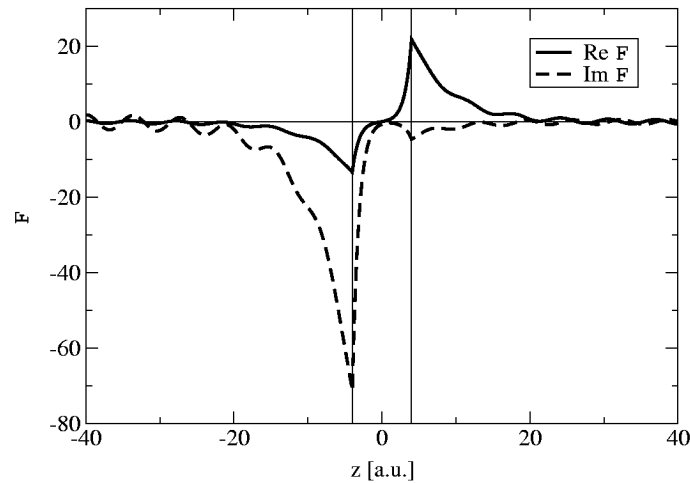


Abbildung 5.17: Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion am Transmissionsmaximum der Resonanz für eine 8 a.u. dicke Barriere mit zwei identischen Grenzflächenzuständen bei $z = \pm D/2$ der Stärke $\beta = 1.3$ a.u. Ryd. Die Barriere ist durch zwei senkrechte Linien angedeutet.

Die Wellenfunktion an der Resonanzenergie ist in Abbildung 5.17 dargestellt. Dabei erkennt man keine Symmetrie mehr, sondern eine Mischung aus einem symmetrischen (Imaginärteil) und antisymmetrischen (Realteil) Zustand. Weiterhin ist die Amplitude an der rechten Grenzfläche kleiner als an der linken, was konsistent mit dem Übergang zum verstärkten Tunneln ist, falls nur ein Grenzflächenzustand vorliegt. Weiter unten wird die Abhängigkeit von der Barrierendicke detaillierter diskutiert.

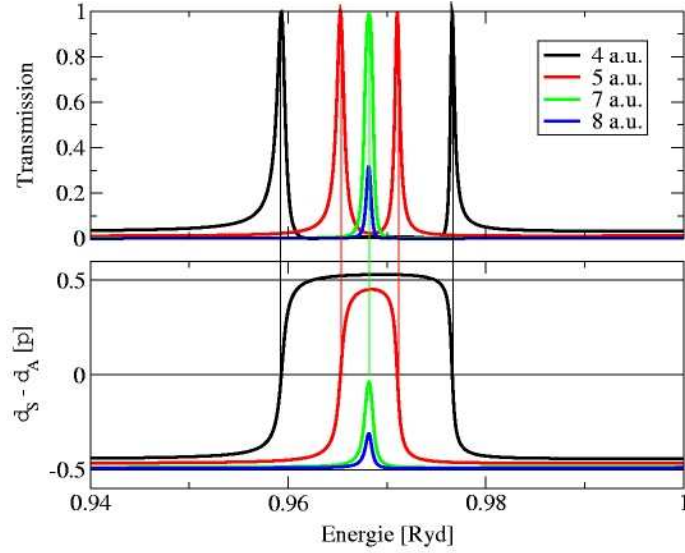


Abbildung 5.18: Transmission (oben) und Streuphasendifferenz $\delta_S - \delta_A$ (unten) für zwei identische Grenzflächenzustände bei $z = \pm D/2$ der Stärke $\beta = 1.3$ a.u. Ryd und unterschiedlichen Barrierendicken D (siehe Legende).

Streuphasen

Mehr Details über den Tunnelprozess ergeben sich aus der Diskussion der Transmission mit Hilfe der Streuphasen. In einem eindimensionalen System mit einem symmetrischen Potential $V(z) = V(-z)$ kann die Transmissions- und die Reflexionsamplitude durch die symmetrische und antisymmetrische Streuphase beschrieben werden [90, 91]

$$t = \cos(\delta_S - \delta_A) e^{i(\delta_S + \delta_A)} \quad (5.48)$$

$$r = i \sin(\delta_S - \delta_A) e^{i(\delta_S + \delta_A)}. \quad (5.49)$$

Dabei ist die symmetrische Streuphase δ_S die Phasenverschiebung zwischen der von links einlaufenden und der nach rechts auslaufenden Welle, wenn von beiden Seiten Wellen mit der gleichen Amplitude einlaufen. Bei der antisymmetrischen Streuphase δ_A laufen von links und rechts zwei Wellen mit entgegengesetzter Amplitude ein. Damit ist die gesamte Wellenfunktion symmetrisch bzw. antisymmetrisch. Die Transmissionswahrscheinlichkeit ist $T = |t|^2 = \cos^2(\delta_S - \delta_A)$. Das analytische Modell ist quasi-eindimensional, da hier der senkrechte Einfall ($\mathbf{k}_{\parallel} = 0$) angenommen wird. Da ein symmetrisches Potential vorausgesetzt wird, gilt die Beschreibung nur für eine Tunnelbarriere ohne oder mit zwei identischen Grenzflächenzuständen, aber nicht für eine Barriere mit nur einem Grenzflächenzustand.

In Abbildung 5.18 ist die Streuphasendifferenz $\delta_S - \delta_A$ (unteres Bild) und die Transmission (oberes Bild) für verschiedene Barrierendicken und zwei identischen Grenzflächenzustände dargestellt. Zunächst wird der Fall diskutiert, bei der die Aufspaltung der beiden Zustände viel größer ist als die Halbwertsbreite (schwarze Linien in Abbildung 5.18). Weit

von den beiden Resonanzen entfernt ist die Streuphase knapp oberhalb von $-\pi/2$ und somit die Transmission sehr klein. An der Resonanz des bindenden, symmetrischen Zustands (linke Resonanz) führt die symmetrische Streuphase δ_S einen Phasensprung um π durch, so dass die Streuphasendifferenz durch Null geht. An dieser Stelle ist die Transmission exakt 1 (Resonanz). Der kontinuierliche Untergrund in der Streuphase aufgrund des Tunnelprozesses führt dazu, dass die Streuphasendifferenz auch $\pi/2$ überquert, wo die Transmission exakt Null wird (Antiresonanz). Dieser Effekt wird Fano Effekt genannt [89]. An der Resonanz des antibindenden, antisymmetrischen Zustands (rechte Resonanz) erfährt die antisymmetrische Streuphase δ_A einen Phasensprung um π , so dass sich die Differenz um $-\pi$ ändert. Zuerst überquert die Streuphasendifferenz wieder den Wert von $\pi/2$, was zu der zweiten Antiresonanz führt. Beim anschließenden Nulldurchgang besitzt die Transmission ihr zweites Maximum mit voller Transmission. Zu noch höheren Energien hin liegt die Streuphasendifferenz wieder knapp oberhalb von $-\pi/2$.

Wird nun die Barrierendicke vergrößert, so verringert sich aufgrund des abnehmenden Überlapps der Orbitale in der Barriere die Aufspaltung des bindenden und antibindenden Zustands. Eine andere Möglichkeit wäre, die Halbwertsbreite der Resonanzen über den Kopplungsparameter α zu vergrößern. Dieses wird hier aber nicht bevorzugt, da dies auch die Bandstruktur in den Bulk Elektroden ändern würde. So könnte der hier diskutierte Effekt nicht mehr eindeutig identifiziert werden. Wird die Aufspaltung durch eine dickere Barriere verkleinert und überlappen die beiden Resonanzen etwas, so kompensieren sich teilweise die beiden entgegengesetzten Phasensprünge. Die Überquerung von $\pi/2$ und somit die beiden Antiresonanzen gehen zuerst verloren (hier bei einer Barrierendicke von etwa 5 a.u.). Wird die Barrierendicke weiter vergrößert, so gibt es eine kritische Barrierendicke, ab der die Streuphasendifferenz keinen Nulldurchgang mehr besitzt, und somit die volle Transmission verschwindet (bei einer Barrierendicke von etwa 7 a.u.). Dennoch ist die Transmission durch die Resonanz um Größenordnungen höher als die durch den Tunnelprozess (siehe Barrierendicke von 8 a.u.). Bei noch dickeren Barrieren kompensieren sich die beiden Phasensprünge nahezu vollständig und der Einfluss der Resonanz wird drastisch reduziert.

Somit zeigt die Diskussion der Streuphase, dass die Transmission durch die Resonanzen bis zu einer kritischen Barrierendicke exakt 1 und an den Antiresonanzen exakt 0 beträgt. Sobald die beiden Antiresonanzen überlappen, geht die verschwindende Transmission durch die Antiresonanzen verloren. Bei einer noch größeren Barrierendicke verschmelzen auch die beiden Resonanzmaxima, und es kann keine volle Transmission mehr durch die Resonanz beobachtet werden.

Barrierendickenabhängigkeit

Die im letzten Unterabschnitt diskutierte Abhängigkeit der maximalen Transmission von der Barrierendicke bzw. der Aufspaltung der beiden Zustände wird in Abbildung 5.19 noch deutlicher. Dort ist die maximale Transmission durch die Resonanzen bei einer und bei zwei identischen Grenzflächenzuständen in Abhängigkeit der Barrierendicke gezeichnet. Bei dem reinen Tunnelprozess ohne Grenzflächenzustände ist die Transmission bei einer konstanten

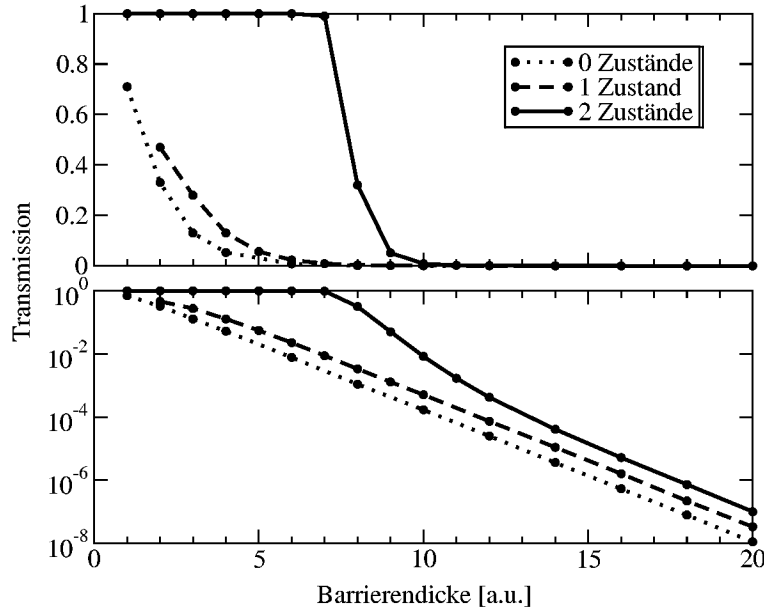


Abbildung 5.19: Abhängigkeit der Transmission von der Barrierendicke ohne Grenzflächenzustände an der Energie $E = 0.97$ Ryd (punktierte Linie) zusammen mit der maximalen Transmission an der Resonanz bei einem (gestrichelte Linie) und bei zwei identischen Grenzflächenzuständen (ausgezogene Linie) der Stärke $\beta = 1.3$ a.u. Ryd. Dargestellt in einer linearen (oben) und einer logarithmischen (unten) Transmissionsskala.

Energie von 0.97 Ryd ausgewertet worden.

Die Transmission ohne Grenzflächenzustände zeigt das erwartete exponentielle Abfallverhalten für Barrierendicken ab etwa 3 a.u. Bei einer Anpassung des Graphen an eine Exponentialfunktion wird für große Barrierendicken die erwartete Abklingkonstante nach (5.17) gefunden: $e^{-2\kappa D}$ mit $\kappa = \sqrt{V_B - E} = \sqrt{(1.2 - 0.97) \text{ Ryd}} = 0.48 \text{ a.u.}^{-1}$. Für kleinere Barrierendicken geht die Transmission quadratisch gegen 1. Bei einem Grenzflächenzustand wird derselbe exponentielle Abfall beobachtet, allerdings verstärkt gegenüber dem normalen Tunneln. Daher wird dies auch verstärktes Tunneln genannt. Ein komplett anderes Ergebnis ergibt sich bei zwei identischen Grenzflächenzuständen. Wie bei der Diskussion der Streuphase gezeigt wurde, gibt es eine kritische Barrierendicke, bis zu der die Transmission in den Resonanzen exakt 1 ist. Hier liegt diese kritische Dicke zwischen 6 und 7 a.u. Für dickere Barrieren fällt die maximale Transmission sehr steil ab, ist aber dennoch um Größenordnungen größer als die beiden anderen Tunnelprozesse. Dieser Übergang zum verstärkten Tunneln ist für den integrierten Leitwert in *ab initio* Rechnungen wichtig, wie weiter unten ausführlicher diskutiert wird. Ab einer Dicke von etwa 14 a.u. zeigt auch die Barriere mit zwei identischen Grenzflächenzuständen dasselbe exponentielle Verhalten wie in den beiden anderen Fällen (verstärktes Tunneln).

Name	Bedeutung	Größe	Einheit
E_F	Fermienergie	0.4	Ryd
V_B	Höhe der Potentialbarriere	0.7	Ryd
D	Barrierendicke	6	a.u.
g_x	Reziproker Gittervektor in x Richtung	1	a.u. ⁻¹
g_y	Reziproker Gittervektor in y Richtung	1	a.u. ⁻¹
V_0	Konstantes Kristallpotential	0	
V_{g_x, g_y}	Fourierkoeffizient des Kristallpotentials	-0.025	Ryd
$V_{g_x, -g_y}$	Fourierkoeffizient des Kristallpotentials	-0.025	Ryd
V_{0, g_y}	Fourierkoeffizient des Kristallpotentials	-0.05	Ryd
$V_{g_x, 0}$	Fourierkoeffizient des Kristallpotentials	-0.05	Ryd
β	Bindungsstärke des Grenzflächenzustandes	1.3	a.u. Ryd

Tabelle 5.2: Verwendete Parameter im dreidimensionalen analytischen Modell.

5.2.3 Dreidimensionales Modell mit beliebigem Einfall

In diesem Abschnitt wird der allgemeine Fall für beliebigen Einfall der Elektronen auf die Grenzfläche im analytischen Modell untersucht. Da hier \mathbf{k}_{\parallel} variiert wird, wird die Energie konstant gehalten. Zusätzlich wird eine oszillatorische Variation des Kristallpotentials in x und in y Richtung zugelassen, so dass bis zu 9 propagierende Bänder in den Bulk-Elektroden vorhanden sein können: $n_x, n_y = -1, 0, 1$. Daher wird die Transmissions- und die Reflexionsmatrix zu einer (9×9) Matrix. In der Tabelle 5.2 sind die verwendeten Parameter im analytischen Modell aufgelistet. Anhand des dreidimensionalen Modells wird gezeigt, dass die für den senkrechten Einfall in Abhängigkeit der Energie gewonnenen Eigenschaften der Hot Spots auch für eine konstante Energie in Abhängigkeit von \mathbf{k}_{\parallel} gültig sind.

In Abbildung 5.20 sind die Fermiflächen der vorhandenen Bänder gezeichnet. Die übrigen Bänder liegen energetisch oberhalb der Fermienergie und sind somit hier nicht von Bedeutung. Das untere Band verhält sich wie $\mathbf{k}_{\parallel}^2 + k_z^2 = E_F$, während das Obere der Zurückfaltung des unteren Bandes aus der zweiten zweidimensionalen Brillouinzone (2DBZ) in k_x und k_y Richtung entspricht. Am Rand der 2DBZ sind beide Bänder aufgespalten, wie es nach dem nahezu freien Elektronenmodell erwartet wird.

Der Leitwert für den reinen Tunnelprozess ohne Grenzflächenzustand ist in Abbildung 5.21 abgebildet. Dieser Fall entspricht dem Leitwert von Majoritätselektronen in *ab initio* Rechnungen. Es ist ein Maximum am $\bar{\Gamma}$ Punkt ($\mathbf{k}_{\parallel} = 0$) zu erkennen, da dort die Barriere effektiv am niedrigsten ist (siehe Gleichung (5.17)). Der Einfluss der zurückgefalteten Bänder am Rand der 2DBZ ist gering, obwohl hier zwei Bänder für den Stromtransport zur Verfügung stehen. Für das obere Band ist aber die effektive Barriere wesentlich höher als für das untere Band.

In Abbildung 5.22 ist der Leitwert für einen Grenzflächenzustand dargestellt. Dies entspricht der antiparallelen Ausrichtung der magnetischen Momente in den ferromagnetischen

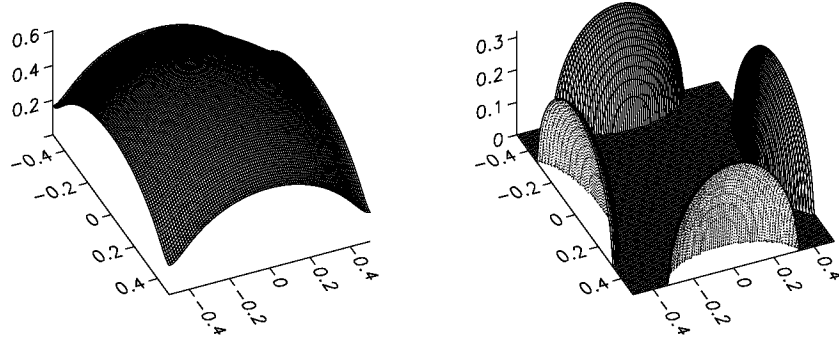


Abbildung 5.20: Fermifläche des unteren Bandes (links) und des oberen Bandes (rechts) im dreidimensionalen analytischen Modell. Dargestellt ist die k_z Komponente in Abhängigkeit von \mathbf{k}_{\parallel} in der gesamten 2DBZ. Die übrigen Bänder befinden sich oberhalb der Fermienergie. Die reziproken Vektoren sind in Einheiten von a.u.^{-1} angegeben. Der Untergrund $k_z = 0$ im rechten Bild ist ein Artefakt des Zeichenprogramms.

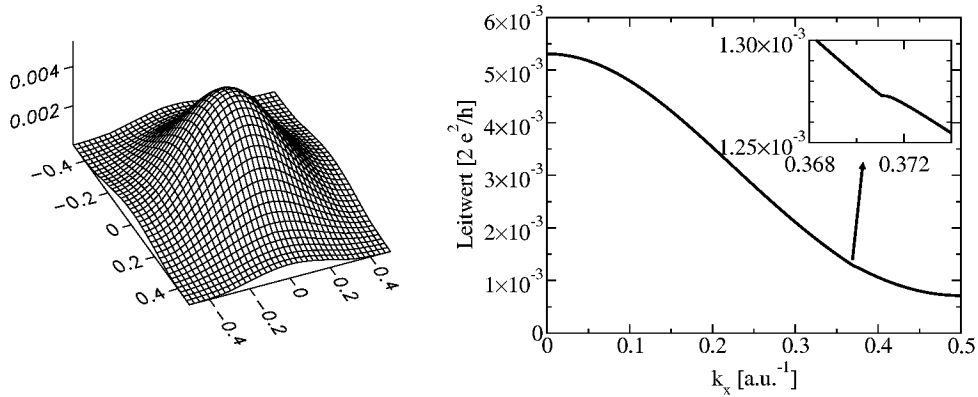


Abbildung 5.21: Leitwert an der Fermienergie im analytischen Modell über der gesamten 2DBZ (links) ohne Grenzflächenzustände. Rechts ist ein Schnitt entlang der Linie $k_y = 0$ dargestellt. Die reziproken Vektoren sind in Einheiten von a.u.^{-1} und der Leitwert ist in $2e^2/h$ angegeben. Das kleine Diagramm zeigt den Bereich vergrößert, an dem das obere Band startet.

Elektroden. Die sehr scharfen Maxima durch die Grenzflächenresonanz ergeben in dem linken Bild eine Kammstruktur, die durch die endliche Anzahl von \mathbf{k}_{\parallel} Punkten hervorgerufen wird. Tatsächlich handelt es sich aber um einen kontinuierlichen, sehr dünnen Wall. Dieser

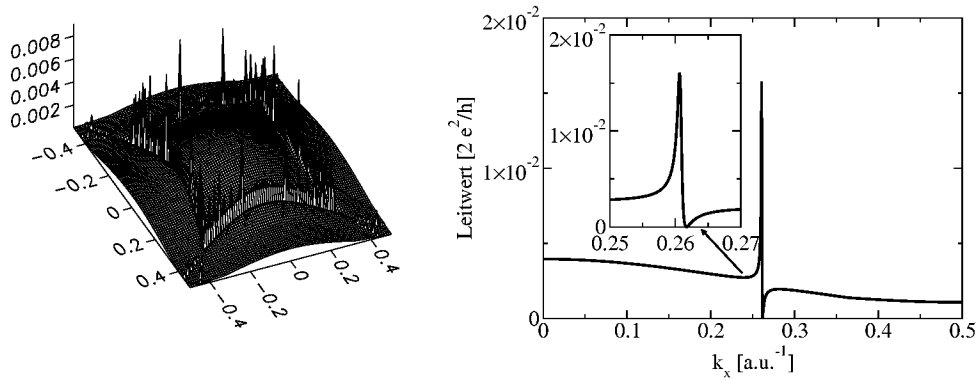


Abbildung 5.22: Leitwert an der Fermienergie im analytischen Modell über der gesamten 2DBZ (links) mit einem Grenzflächenzustand. Rechts ist ein Schnitt entlang der Linie $k_y = 0$ dargestellt, um die sehr scharfen Maxima aufzulösen. Durch die endliche Anzahl von \mathbf{k}_{\parallel} Punkten entsteht eine artifizielle Kammstruktur. Die reziproken Vektoren sind in Einheiten von a.u.^{-1} und der Leitwert ist in $2e^2/h$ angegeben.

Wall liegt entlang des Randes der Fermifläche des oberen Bandes. Besser erkennbar ist der dünne Wall im Schnitt entlang der Linie $k_y = 0$ (siehe rechtes Diagramm in Abbildung 5.22). Es wird ein erhöhter Leitwert in der Resonanz und ein verschwindender Leitwert in der Antiresonanz beobachtet. Im Untergrund des Leitwertes ist der normale Tunnelprozess erkennbar (siehe Abbildung 5.21).

Der Leitwert der Minoritätselektronen in *ab initio* Rechnungen mit Hot Spots entspricht in dem analytischen Modell dem Tunnelprozess mit zwei identischen Grenzflächenzuständen. Die Transmission für diesen Fall ist in Abbildung 5.23 dargestellt. Wie im letzten Bild wird auch hier die Doppelkammstruktur von den sehr schmalen Maxima hervorgerufen, die sich besser in dem Schnitt entlang $k_y = 0$ erkennen lassen. Die volle Transmission durch die beiden aufgespaltenen Resonanzen ist zu sehen. Die Antiresonanzen sind für die gezeigte 6 a.u. dicke Barriere bereits verschwunden, während sie bei einer Dicke von 4 a.u. noch vorhanden sind. Durch die große Skala ist der Leitwert aufgrund des normalen Tunnelprozesses nicht mehr aufgelöst, weil er um mehrere Größenordnungen kleiner ist (siehe Abbildung 5.21 und 5.22).

Ein qualitativer Unterschied besteht zwischen den Ergebnissen des dreidimensionalen analytischen Modells und den *ab initio* Co/Vakuum/Co(001) Rechnungen (siehe Abbildung 5.4). Im letzten Fall liegen die Hot Spots entlang der Hauptsymmetrielinie $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} , aber im analytischen Modell sind sie kontinuierlich am Rand der Fermifläche des oberen Bandes lokalisiert. Der Unterschied kommt daher, weil das Grenzflächenpotential im analytischen Modell $V_G = -\beta_{1,2}\delta(z \pm D/2)$ konstant in der x, y Ebene ist. Somit besitzen die Grenzflächenzustände keine \mathbf{k}_{\parallel} Abhängigkeit. Die Symmetrie der Grenzflächenzustände in den *ab initio* Co/Vakuum/Co(001) Rechnungen wird im nächsten Abschnitt detailliert untersucht.

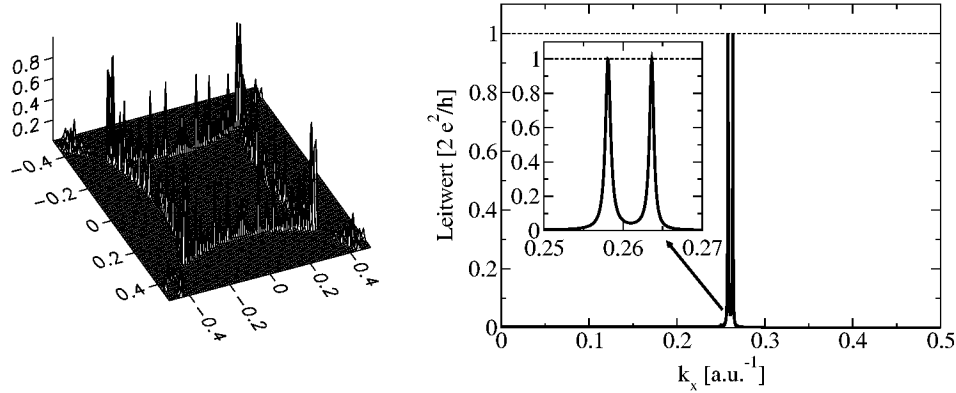


Abbildung 5.23: Leitwert an der Fermienergie im analytischen Modell über der gesamten 2DBZ (links) mit zwei identischen Grenzflächenzuständen. Rechts ist ein Schnitt entlang der Linie $k_y = 0$ dargestellt, um die sehr scharfen Doppelpmaxima aufzulösen. Durch die endliche Anzahl von \mathbf{k}_{\parallel} Punkten entsteht eine artifizielle doppelte Kammstruktur. Die reziproken Vektoren sind in Einheiten von a.u.^{-1} und der Leitwert ist in $2e^2/h$ angegeben.

5.3 Ab initio Ergebnisse der Hot Spots

5.3.1 Struktur der Hot Spots

In diesem Abschnitt werden die *ab initio* Leitwerte für die Co/Vakuum/Co(001) TMR Struktur und insbesondere die Hot Spots genauer diskutiert. Die berechneten Leitwerte im KKR Formalismus sind in der Einleitung dieses Kapitels in Abbildung 5.4 dargestellt. Dieselbe Struktur mit jedoch 3 ML Vakuum ist auch mit Hilfe der *ab initio* TB-LMTO¹¹ Methode berechnet worden (aus [92]). Darin wird der Leitwert mit einer Transfermatrixmethode ermittelt [20], bei der für jeden \mathbf{k}_{\parallel} Vektor die lokalisierten und delokalisierten Eigenzustände bestimmt werden. Der so bestimmte Leitwert in Abhängigkeit des \mathbf{k}_{\parallel} Vektors wird in Abbildung 5.24 gezeigt. Es wird nur ein sehr kleiner Ausschnitt aus der 2DBZ entlang der $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} Hauptsymmetrielinie im Bereich der Hot Spots vergrößert dargestellt. Um diese Auflösung zu erhalten, werden ca. 1 Million \mathbf{k}_{\parallel} Punkte im irreduziblen Teil der 2DBZ benötigt. Daran lässt sich bereits der enorme numerische Aufwand zur genauen Auflösung der Hot Spots erkennen.

Der Leitwert im Majoritätsband (Abbildung 5.24, Bild oben links) ist in dem gezeigten kleinen Bereich der 2DBZ nahezu konstant und schon auf $7 \times 10^{-7} e^2/h$ gedämpft. Es sind keine Maxima zu erkennen.

In dem Leitwert für die antiparallele Ausrichtung der magnetischen Momente (Abbildung 5.24, rechts) gibt es ein Doppelpmaximum, das sich symmetrisch auf beiden Seiten der $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} Hauptsymmetrielinie befindet. Die Transmission in den Maxima ist etwa

¹¹Englisch: *Tight Binding-Linear Muffin Tin Orbitals*

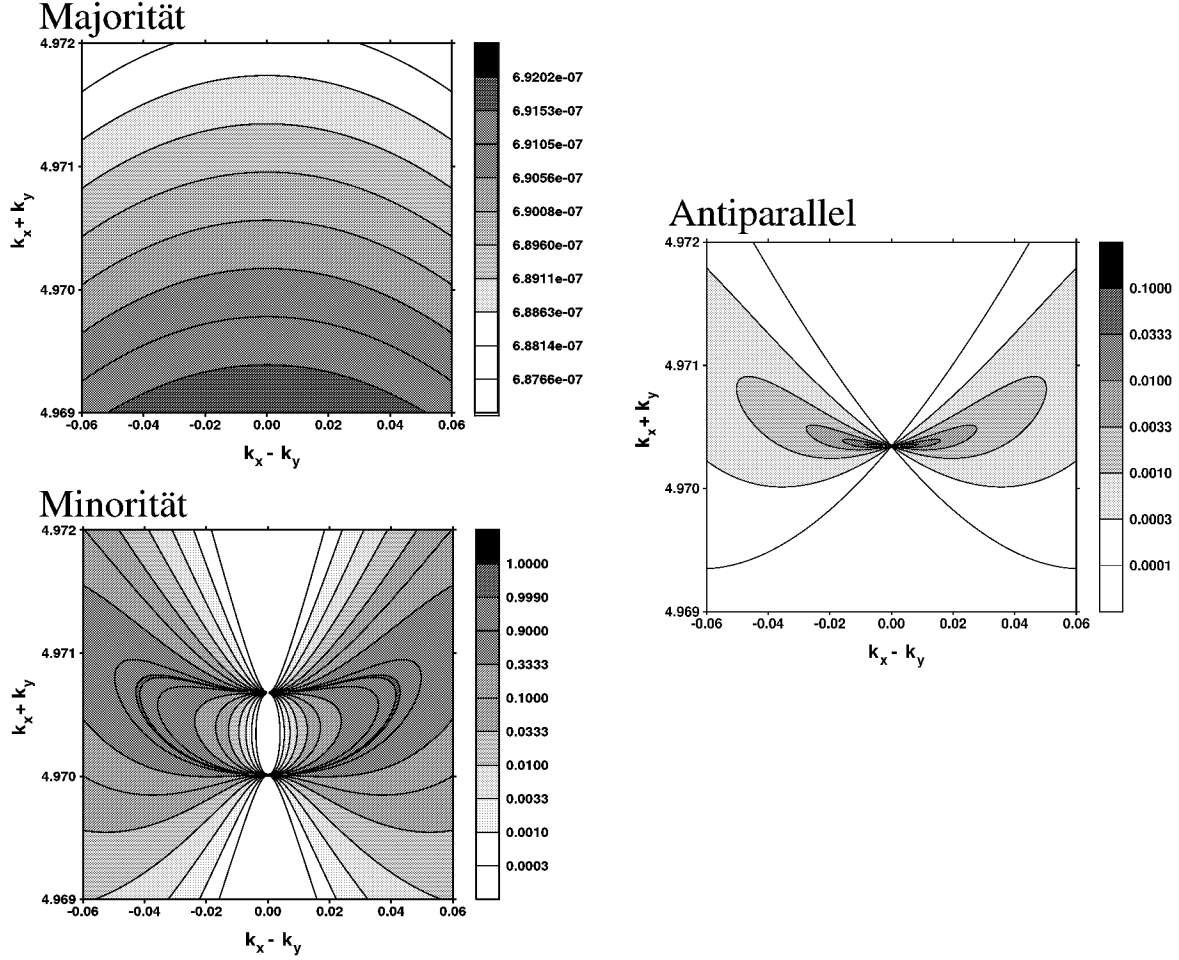


Abbildung 5.24: *Ab initio* TB-LMTO Berechnungen des Leitwertes (in Einheiten von e^2/h) für eine Co/3 Vakuum/Co(001) Struktur (aus [92]). Der Bereich um die Hot Spots ist stark vergrößert dargestellt. Die $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} Hauptsymmetrielinie verläuft in den Bildern senkrecht durch die Mitte ($k_x - k_y = 0$). Das magnetische Moment der Co Halbräume ist oben links (Majoritätselektronen) und unten links (Minoritätselektronen) parallel und im rechten Bild antiparallel ausgerichtet. Dunklere Flächen symbolisieren einen höheren Leitwert. Für eine geeignete Darstellung werden unterschiedliche Leitwertskalen verwendet. Die reziproken Vektoren sind in Einheiten von $1/d_{\text{Co}}$ angegeben.

$0.1e^2/h$ und nimmt für etwas entferntere Zustände schnell um mehrere Größenordnungen ab. Zur Hauptsymmetrielinie hin laufen beide Maxima in dem reziproken Punkt $k_x^\pm = k_y^\pm = (2.485\ 172)1/d_{\text{Co}}$ zusammen. In diesem Punkt verschwindet die Transmission, da die Zustände lokalisiert sind und nicht am Stromtransport teilnehmen können. Dies lässt sich auch an der verschwindenden Halbwertsbreite erkennen. An dieser Stelle existiert im Minoritätsband ein Grenzflächenzustand, der aber aufgrund seiner Symmetrie

nicht an propagierende Co Zustände koppeln kann. Der Grenzflächenzustand ist symmetrisch zur Spiegelung an der Hauptsymmetrielinie, aber alle propagierenden Zustände auf der $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} Linie im Bulk Co sind antisymmetrisch. Jedoch mischen die Bulk Zustände für kleine Abweichungen von der Hauptsymmetrielinie mit anderen Zuständen, die kompatibel zur Symmetrie des Grenzflächenzustands sind, so dass dieser resonant wird. Die Mischung der Bulk Zustände bestimmt die Kopplung der Grenzflächenzustände an delokalisierte Co Zustände und somit auch die Halbwertsbreite. Je stärker die Kopplung, desto breiter werden die Resonanzen. Diese Kopplung entspricht dem Parameter α im analytischen Modell. Die antiparallele Konfiguration wird mit Hilfe des analytischen Modells mit dem Effekt des verstärkten Tunnelns erklärt, da die Grenzflächenresonanzen für jede Spinrichtung nur auf einer Seite der Barriere vorhanden sind. Auf der anderen Seite sehen die Minoritätselektronen die Zustandsdichte der Majoritätselektronen, die keine Grenzflächenzustände besitzen.

Im Minoritätsband (Abbildung 5.24, unten links) dagegen sind die beiden Doppelmaxima entlang der Hauptsymmetrielinie symmetrisch um den Grenzflächenzustand (siehe antiparallele Konfiguration) in die reziproken Punkte: $k_x^\pm = k_y^\pm = (2.485\,172 \pm 0.000\,167)1/d_{\text{Co}}$ aufgespalten. In den Maxima gibt es eine Linie mit voller Transmission ($T = 1$), die in der am dunkelsten gefärbten Fläche liegt. Die Transmission durch Zustände mit einem kleinen Abstand von dieser Linie fällt nur langsam im Vergleich zur antiparallelen Ausrichtung der magnetischen Momente ab. Es existiert ein sehr großer Bereich, in dem die Transmission oberhalb von $0.1e^2/h$ liegt. Dieser ausgedehnte Bereich ist für den integrierten Leitwert entscheidend und wird weiter unten näher untersucht. Die beiden aufgespaltenen Maxima sind die bindenden und antibindenden Zustände, die aus den beiden Grenzflächenzuständen auf den beiden Seiten der Vakuumbarriere gebildet werden. Die Elektronen in diesen Zustände zeigen eine volle Transmission durch die Barriere, solange die Aufspaltung größer ist als die Halbwertsbreite. Dieses Verhalten wurde bereits im analytischen Modell gefunden und dort durch resonantes Hüpfen der Elektronen zwischen den Grenzflächen in den Hybriden erklärt (volle Transmission durch resonantes Hüpfen). Der ausgedehnte Bereich mit einer noch hohen Transmission entspricht im analytischen Modell dem Übergang zum verstärkten Tunneln. Dieses Bild zeigt, dass die volle Transmission verloren geht, sobald die Resonanzbreite größer als die Aufspaltung wird. In diesem Fall ist die Lebensdauer in den Grenzflächenresonanzen kürzer als die resonante Hüpfzeit, wodurch der Hüpfprozess unwahrscheinlicher wird und die Elektronen mehr und mehr durch die Barriere tunneln müssen. Dieses wird begleitet mit einer starken Abnahme der Transmission. Im Folgenden werden weitere Eigenschaften der Hot Spots untersucht und mit Hilfe der Ergebnisse des analytischen Modells erklärt.

5.3.2 Einfluss auf den integrierten Leitwert

Um den Einfluss der Hot Spots auf den integrierten Leitwert genauer zu untersuchen, wird für verschiedene TMR Systeme der Beitrag der Hot Spots zum gesamten Leitwert mit Hilfe der *ab initio* LMTO Methode berechnet (aus [92]). Die Ergebnisse zusammen mit der relativen Fläche der Hot Spots in der 2DBZ sind in Tabelle 5.3 aufgelistet. Da der Leitwert

System			Rel. Fläche [%]	Rel. T_{tot} [%]
Co/3 ML Vak./Co	Antiparallel	0	0	
Co/3 ML Vak./Co	Min.	0.0014	24.1	
Co/3 ML Vak./5 ML Co/Cu	Min.	0.0003	5.2	
Co/3 ML Vak./3 ML Cu/Co	Min.	0	0	
Cu/5 ML Co/3 ML Vak./5 ML Co/Cu	Min.	0.0471	64.9	

Tabelle 5.3: Beiträge zum gesamten Leitwert in der 2DBZ mit einer Transmission zwischen $0.1 < T(\mathbf{k}_{\parallel}) \leq 1$ für verschiedene Systeme (erste Spalte) und unterschiedliche Orientierungen der magnetischen Momente in den Halbräumen (zweite Spalte). Die dritte Spalte gibt die relative Fläche in der 2DBZ und die vierte den relativen Beitrag zur gesamten integrierten Transmission an (aus [92]). Die Heterostrukturen haben eine (001) Orientierung.

durch den Tunnelprozess etwa $1 \times 10^{-3} e^2/h$ beträgt, wird der Beitrag der Hot Spots allen \mathbf{k}_{\parallel} Zuständen mit einer Transmission zwischen

$$0.1 < T(\mathbf{k}_{\parallel}) \leq 1 \quad (5.50)$$

zugeordnet.

Im Co/3 ML Vakuum/Co(001) System bei einer antiparallelen Ausrichtung der magnetischen Momente (1. Zeile) liefern die Hot Spots mit der hier verwendeten Definition keinen Beitrag zum Gesamtleitwert. Dies entspricht im analytischen Modell dem Fall, dass nur ein Grenzflächenzustand vorhanden ist. Zwar existiert in der antiparallelen Konfiguration ein Transmissionsmaximum, aber der gesamte Leitwert wird dadurch nur unwesentlich geändert. Dagegen spielen die Hot Spots im Minoritätsband bei der parallelen Ausrichtung der Momente (zweite Zeile) für den integrierten Leitwert eine große Rolle. Ihr Beitrag beträgt 24.1% zum Gesamtleitwert, aber sie nehmen nur einen winzigen Bruchteil der 2DBZ ein. Die Zahlen belegen die numerischen Schwierigkeiten bei der Integration des Leitwertes, da im Minoritätsband viel mehr \mathbf{k}_{\parallel} Punkte im irreduziblen Teil der Brillouinzone benötigt werden als zum Beispiel im Majoritätsband. In der dritten Zeile wird mit Co/3 ML Vakuum/5 ML Co/Cu ein asymmetrisches System auf Hot Spots untersucht. Obwohl die beiden Halbräume unterschiedlich sind, reichen die 5 ML Co aus, um die Grenzflächenzustände und somit die Hot Spots zu erzeugen. Allerdings ist ihr Einfluss auf den integrierten Leitwert kleiner als im vollständig symmetrischen System (2. Zeile). Dagegen reicht eine leicht asymmetrische Grenzfläche in Co/3 ML Vakuum/3 ML Cu/Co (4. Zeile) aus, um die Hot Spots mit der hier gewählten Definition (5.50) zum Verschwinden zu bringen. Das vollständig symmetrische System in der 5. Zeile zeigt wieder einen sehr starken Einfluss der Hot Spots. Sie tragen zu 64.9% zum gesamten Leitwert bei, nehmen aber mit 0.0471% nur einen winzigen Bruchteil der 2DBZ ein. Dieser sehr hohe Einfluss lässt sich durch Mehrfachreflexionen in der 5 ML Co Schicht, sogenannte Quantentrogzustände, erklären.

Aus den Ergebnissen in Tabelle 5.3 wird klar, dass die Bildung von Hot Spots vollständig symmetrische (2. und 5. Zeile) oder zumindest nahezu symmetrische (3. Zeile) Systeme voraussetzt. Bei asymmetrischen Grenzflächen wie in der 4. Zeile werden die Hot Spots

vollständig unterdrückt. Daher wird vermutet, dass die Hot Spots auch durch eine Grenzflächenrauhigkeit oder durch eine angelegte Bias Spannung, die die energetische Lage der beiden Grenzflächenzustände gegeneinander verschiebt, stark reduziert werden.

Für den integrierten Leitwert sind die Linien mit der vollen Transmission unbedeutend, da Linien bei der Integration vom Maß Null sind und somit kein Gewicht haben. Für den Gesamtleitwert ist der große Bereich um diese Linien entscheidend (siehe Abbildung 5.24). Dort sind die bindenden und antibindenden Zustände bereits verschmolzen, zeigen aber dennoch einen im Vergleich zu den Tunnelzuständen um mehrere Größenordnungen höheren Leitwert. Dies entspricht dem Effekt des Übergangs zum verstärkten Tunneln in dem analytischen Modell. Da dieser Effekt nur bei identischen Grenzflächenzuständen auftritt, ist er in der antiparallelen Konfiguration nicht vorhanden.

Da in den *ab initio* Rechnungen die Halbwertsbreite der Resonanzmaxima zur Hauptsymmetrielinie hin gegen Null geht, existieren für jede beliebige Barrierendicke k_{\parallel} Vektoren, bei denen die Halbwertsbreite kleiner ist als die noch so geringe Aufspaltung der bindenden und antibindenden Zustände. Daher gibt es in der 2DBZ für *jede* Barrierendicke Zustände, die die Barriere ohne Intensitätsverlust durchqueren können! Allerdings nehmen die Hot Spots bei größeren Dicken eine immer kleinere Fläche in der 2DBZ ein, so dass dieser Effekt immer unbedeutender wird. Wie mit Hilfe des analytischen Modells gezeigt wurde, verhalten sich die Hot Spots für sehr große Barrierendicken wie bei der verstärkten Transmission bei nur einem Grenzflächenzustand (siehe Abbildung 5.19). Das bedeutet, dass der ausgedehnte Bereich um die Linie mit voller Transmission mit wachsender Dicke immer schmaler und somit unbedeutender wird. Im asymptotischen Grenzfall bleibt von den Hot Spots nur noch eine infinitesimal schmale Linie mit voller Transmission übrig, die aber keinen Beitrag zum gesamten Leitwert liefert, da sie vom Maß Null ist. Da allerdings auch der integrierte Leitwert durch den Tunnelprozess mit wachsender Barrierendicke sehr schnell exponentiell kleiner wird, soll im Folgenden der Einfluss der Hot Spots abgeschätzt werden. Der gesamte, integrierte Leitwert G_{tot} setzt sich aus dem Tunnelprozess G_T und den Hot Spots G_H zusammen: $G_{\text{tot}} = G_T + G_H$. Der Leitwert aufgrund des Tunnelprozesses wird für große Barrieren D gedämpft wie

$$G_T \approx e^{-2\kappa_{\min} D} \frac{e^2}{h}. \quad (5.51)$$

Der Leitwert der Hot Spots wird durch die Fläche A_H in der 2DBZ abgeschätzt, in der die Transmission in der Größenordnung von 1 liegt

$$G_H \approx A_H \frac{e^2}{h}.$$

Die Fläche der Hot Spots wird als ein Kreisring mit dem Durchmesser der Aufspaltung Δ des bindenden und antibindenden Zustands angenommen (siehe Abbildung 5.24). Der hohe Leitwert liegt entlang des Kreisumfangs mit einer Breite von etwa $\Delta/2$. Wie im analytischen Modell gezeigt ist, fällt die Aufspaltung mit wachsender Barrierendicke exponentiell ab: $\Delta \propto e^{-\kappa_H D}$. Somit verhält sich der Leitwert durch die Hot Spots wie

$$G_H \approx e^{-2\kappa_H D} \frac{e^2}{h}. \quad (5.52)$$

Es ist entscheidend, wie groß der exponentielle Dämpfungsfaktor κ_H für die Hot Spots ist. Der Dämpfungsfaktor des Tunnelprozesses κ_{\min} ist der kleinste erlaubte in der 2DBZ und liegt bei der Vakuumbarriere sowie bei vielen anderen Isolatoren am $\bar{\Gamma}$ Punkt. Somit gilt $\kappa_H \geq \kappa_{\min}$. Wichtig ist, ob der Fall auftreten kann, dass $\kappa_H = \kappa_{\min}$ ist. Im analytischen Modell wird allgemein gezeigt, dass die Hot Spots zu einem energetisch höheren Band gehören, das deshalb eine höhere Dämpfungskonstante als κ_{\min} besitzt. Speziell im Fall von Co/Vakuum/Co(001) Heterostrukturen befinden sich die Hot Spots zwischen dem $\bar{\Gamma}$ und dem \bar{X} Punkt und erfahren schon deshalb eine stärkere Dämpfung in der Barriere als die Zustände am $\bar{\Gamma}$ Punkt. Daher ist der Einfluss der Hot Spots für große Barrierendicken vernachlässigbar und wird exponentiell kleiner.

Wie oben erwähnt wurde, gibt es für jede noch so große Barrierendicke \mathbf{k}_{\parallel} Punkte in den Hot Spots mit einer vollständigen Transmission. Da aber bei den Rechnungen ein endliches und meistens statisches \mathbf{k}_{\parallel} Netz verwendet wird, werden ab einer bestimmten Barrierendicke keine Hot Spots mit einer vollständigen Transmission mehr gefunden. Das liegt daran, dass die exponentiell schmaler werdenden *Hot Spots* durch das endliche \mathbf{k}_{\parallel} Gitternetz nicht mehr abgetastet werden. Zeigen aus diesen Gründen die Hot Spots keine vollständige Transmission mehr, so kann der in diesen Fällen begangene Fehler bei der Integration des Leitwerts abgeschätzt werden zu

$$\Delta G_H \approx \frac{1}{(N-1)^2} \frac{e^2}{h}, \quad (5.53)$$

wobei ein äquidistantes $N \times N$ dichtes \mathbf{k}_{\parallel} Netz angenommen wird. Um diesen Fehler vernachlässigen zu können, muss er viel kleiner als der Leitwert durch den Tunnelprozess (5.51) sein

$$\begin{aligned} G_T &\gg \Delta G_H \\ \Rightarrow e^{-2\kappa_{\min}D} &\gg \frac{1}{(N-1)^2} \\ \Rightarrow N &\gg e^{\kappa_{\min}D}. \end{aligned} \quad (5.54)$$

Das bedeutet, dass für eine korrekte Brillouinzoneintegration das \mathbf{k}_{\parallel} Netz exponentiell mit der Barrierendicke dichter werden muss, was numerisch eine große Herausforderung ist. Allerdings wurde oben gezeigt, dass der Einfluss der Hot Spots auf den gesamten integrierten Leitwert exponentiell mit der Barrierendicke abnimmt. So kann ab einer bestimmten Dicke der Einfluss der Hot Spots vernachlässigt werden, und das \mathbf{k}_{\parallel} Netz muss nicht weiter verfeinert werden.

Diese Abschätzung zeigt, wie numerisch aufwendig die korrekte Behandlung der Hot Spots ist. Besonders für dicke Barrieren, die sehr rechenintensiv sind, da die Zahl der Atome groß ist, werden sehr viele \mathbf{k}_{\parallel} Vektoren benötigt, um den Einfluss der Hot Spots auf die gesamte Transmission zu beschreiben. Deswegen wurden einige Anstrengungen unternommen, die Hot Spots zu unterdrücken oder besser zu beschreiben. Hierauf wird in der Diskussion eingegangen.

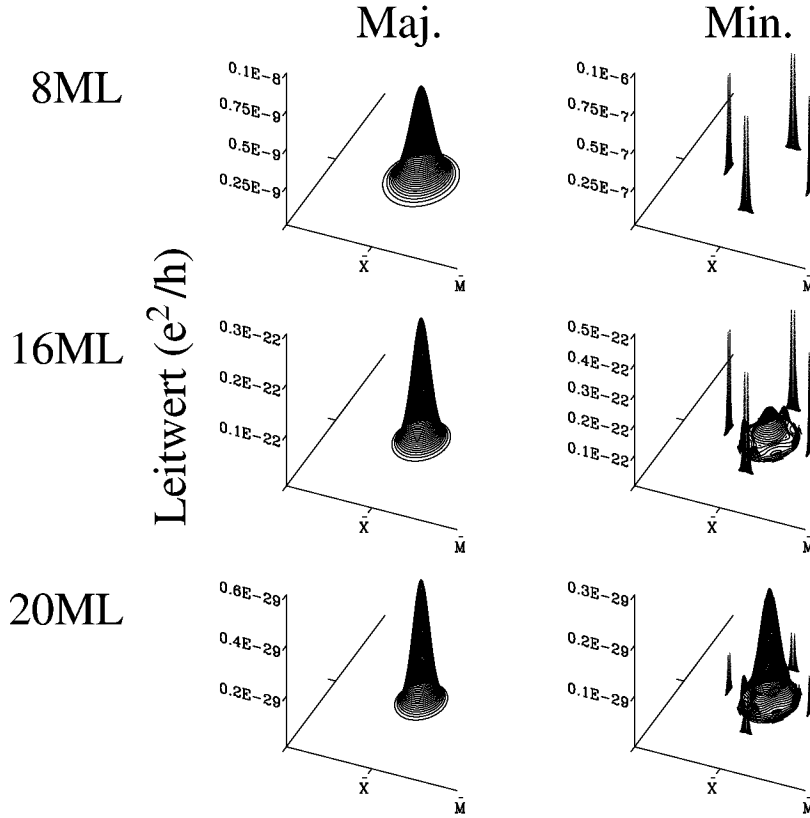


Abbildung 5.25: Leitwerte über der zweidimensionalen Brillouinzone aus *ab initio* KKR Rechnungen für Co/Vakuum/Co(001) TMR Strukturen mit 8, 16 und 20 ML Vakuumbarrieren. Die Bilder für eine 4 ML dicke Barriere sind in der Einleitung in Abbildung 5.4 dargestellt. Die integrierten Leitwerte sind in Tabelle 5.4 aufgelistet. Die magnetischen Momente der Co Halbräume sind parallel ausgerichtet. Der Abstand der Konturlinien beträgt jeweils ein Hundertstel der gezeigten Skalenlänge.

5.3.3 Abhängigkeit von der Barrierendicke

Im Folgenden werden die Hot Spots in den *ab initio* Rechnungen in Abhängigkeit der Barrierendicke untersucht. Dazu werden die Ergebnisse der *ab initio* KKR Rechnungen von Co/Vakuum/Co(001), wie sie schon in der Einleitung gezeigt wurden, diskutiert. In Abbildung 5.25 sind die k_{\parallel} abhängigen Leitwerte im Majoritäts- (links) und Minoritätsband (rechts) für verschiedenen Barrierendicken abgebildet. Die integrierten Leitwerte sind in Tabelle 5.4 aufgelistet.

Der k_{\parallel} aufgelöste Leitwert für eine 4 ML dicke Vakuumbarriere ist in der Einleitung in Abbildung 5.4 abgebildet. Dort sind im Minoritätsband die sehr ausgeprägten Hot Spots mit voller Transmission erkennbar. Der integrierte Leitwert im Minoritätsband beträgt aufgrund der Hot Spots etwa das Siebenfache des Majoritätsbandes. Wird nun die Barrie-

Barrierendicke (ML)	$G_{\text{maj}}(e^2/h)$	$G_{\text{min}}(e^2/h)$
4	1.1×10^{-4}	7.4×10^{-4}
8	1.5×10^{-11}	3.7×10^{-11}
12	2.2×10^{-18}	2.4×10^{-18}
16	3.5×10^{-25}	2.8×10^{-25}
20	5.9×10^{-32}	4.0×10^{-32}

Tabelle 5.4: Integrierter Leitwert aus *ab initio* KKR Rechnungen für die Co/Vakuum/Co(001) TMR Struktur für verschiedene Barrierendicken. In der linken Spalte ist die Barrierendicke, in der mittleren die Leitwerte für die Majoritäts- und in der rechten für die Minoritätselektronen aufgelistet. Die magnetischen Momente der Co Halbräume sind jeweils parallel ausgerichtet.

rendicke auf 8 ML vergrößert, so können keine Hot Spots mit einer vollen Transmission beobachtet werden. Hier wurden $600 \times 600 \mathbf{k}_{\parallel}$ Punkten in der 2DBZ verwendet. Dennoch wird der gesamte Leitwert im Minoritätsband durch die Hot Spots bestimmt und ist etwa doppelt so groß wie der der Majoritätselektronen. Der Kreuzungspunkt, an dem die integrierten Leitwerte des Majoritäts- und des Minoritätsbandes bei dem hier verwendeten \mathbf{k}_{\parallel} Netz gleich sind, liegt bei einer Barrierendicke von etwa 12 ML. Bei 16 ML ist der Leitwert im Majoritätsband bereits größer als im Minoritätsband. Bei 20 ML nimmt dieser Effekt weiter zu und geht in den asymptotischen Grenzfall über, bei dem die Hot Spots keinen großen Einfluss mehr ausüben.

5.3.4 Aufspaltung der beiden Resonanzen

Mit Hilfe des analytischen Modells wurde gezeigt, dass die volle Transmission durch die Hot Spots erhalten bleibt, so lange die Aufspaltung des bindenden und des antibindenden Zustands größer ist als die Halbwertsbreite (siehe Abbildung 5.18). Sobald die beiden Maxima überlappen, wird die maximale Transmission durch die Hot Spots drastisch reduziert. Die Aufspaltung wird durch den Überlapp der Grenzflächenzustände in der Barriere bestimmt und hängt somit von der Barrierendicke ab. Die Halbwertsbreite kann im analytischen Modell mit Hilfe des Kopplungsparameters α variiert werden. In den *ab initio* Rechnungen kann die Barrierendicke nur in diskreten Schritten von einzelnen Vakuum Monolagen vergrößert werden. Der Kopplungsparameter und somit die Halbwertsbreite kann ebenfalls in den *ab initio* Co/Vakuum/Co(001) Rechnungen in einem großen Bereich "eingestellt" werden, da beides durch die Mischung der antisymmetrischen Zustände auf der $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} Hauptsymmetrielinie mit den propagierenden symmetrischen Zuständen bestimmt wird. Je weiter die Zustände von der Hauptsymmetrielinie entfernt liegen, desto stärker wird die Mischung der Zustände und desto breiter werden die Resonanzmaxima. Dieses Verhalten ist in Abbildung 5.24 für die antiparallele Konfiguration beobachtbar. In Abbildung 5.26 ist der Leitwert in einem kleinen Abstand von $0.007 \, 2\pi/d_{\text{Co}}$ parallel zur $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} Hauptsymmetrielinie für verschiedene Barrierendicken mit Hilfe der *ab initio* KKR Me-

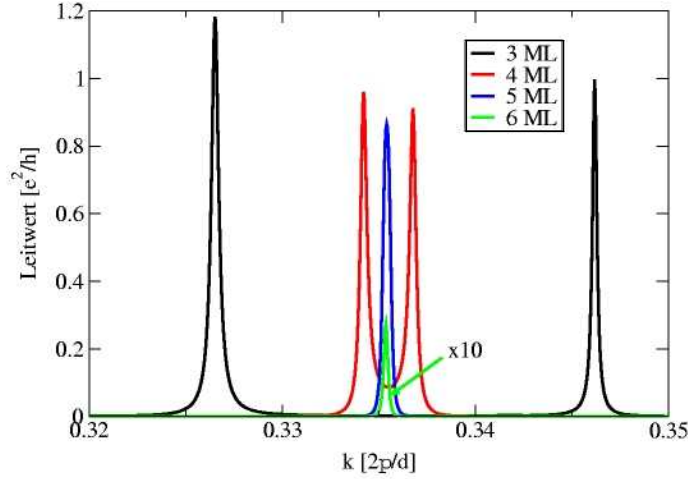


Abbildung 5.26: Leitwert aus *ab initio* KKR Rechnungen für Co/Vakuum/Co(001) Heterostrukturen im Minoritätsband für verschiedene Barrierendicken. Der Leitwert ist in einem konstanten Abstand von $0.007 \, 2\pi/d_{\text{Co}}$ parallel zur $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} Symmetrielinie ausgewertet worden. Der Leitwert für eine 6 ML dicken Vakuumbarriere (grüne Linie) ist zur besseren Sichtbarkeit um den Faktor 10 vergrößert worden.

thode ausgewertet worden. Es lässt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen dem analytischen Modell in Abbildung 5.18 und diesen *ab initio* Ergebnissen erkennen. Für eine 3 ML (schwarze Linie) und 4 ML (rote Linie) dicke Vakuumbarriere sind die beiden Maxima bei dem hier gewählten Abstand von der Hauptsymmetrielinie getrennt und die maximale Transmission beträgt etwa $1e^2/h$ (volle Transmission durch resonantes Hüpfen). Für die 5 ML dicke Barriere (blaue Linie) sind beide Maxima gerade miteinander verschmolzen, aber es ist noch eine sehr hohe Transmission erkennbar. Diese ist für eine 6 ML dicke Barriere (grüne Linie) bereits um mehr als eine Größenordnung reduziert (der Graph wurde zur besseren Sichtbarkeit um den Faktor 10 vergrößert). Dies ist der Übergang zum verstärkten Tunneln, der mit einem starken Abfall des maximalen Leitwertes verbunden ist (siehe Abbildung 5.19).

Allerdings gibt es auch Unterschiede zum analytischen Modell: Einmal lassen sich die Antiresonanzen (verschwindende Transmission) nicht erkennen, da diese von den lorentzverbreiterten Resonanzen überdeckt werden. Die Lorentzverbreiterung wird durch einen kleinen Imaginärteil in der Energie bei der Berechnung des Leitwertes hervorgerufen. Weiter weicht die maximale Transmission von $1e^2/h$ ab, was auf numerische Ungenauigkeiten in der Bestimmung des Leitwertes zurückzuführen ist. Dieses Verhalten der Hot Spots wurden zuerst im analytischen Modell gefunden und danach mit Hilfe der *ab initio* Rechnungen überprüft. Somit konnten trotz der starken Einfachheit des Modells auch Vorhersagen über die Eigenschaften der Hot Spots gemacht werden. Dies zeigt weiterhin, dass die Hot Spots durch das einfache Modell qualitativ sehr gut beschrieben werden können.

5.4 Zusammenfassung und Diskussion

In diesem Kapitel wurde ein sehr interessantes Phänomen vorgestellt, dass zuerst in *ab initio* Rechnungen des \mathbf{k}_{\parallel} aufgelösten Leitwerts von Tunnelmagnetowiderständen entdeckt wurde. Dabei handelt es sich um sehr kleine Bereiche in der zweidimensionalen Brillouinzone, in denen die Elektronen die Tunnelbarriere ohne Intensitätsverlust durchqueren können. Nachdem numerische Ungenauigkeiten ausgeschlossen werden konnten, wurden die sogenannten Hot Spots auf eine verstärkte Transmission durch die Barriere über Grenzflächenzustände zurückgeführt. Jedoch konnten damit einige Fragen (siehe Seite 57) nicht erklärt werden. Erst mit dem hier vorgestellten analytischen Modell und den detaillierten *ab initio* Studien konnten diese beantwortet werden:

- *Warum sehen die Elektronen in den Hot Spots keine Barriere?*

Durch die Wechselwirkung der beiden Grenzflächenzustände auf beiden Seiten der Barriere werden bindende und antibindende Hybride in der Barriere geformt, durch die die Elektronen kohärent von der einen Grenzfläche zur anderen hin und her hüpfen können. Das bedeutet, dass die Elektronen in diesen Zuständen nicht durch die Barriere tunneln müssen, um auf die andere Seite zu gelangen. Dieses wird vollständige Transmission durch resonantes Hüpfen genannt.

- *Warum bestimmen die Hot Spots den integrierten Leitwert?*

Die Hot Spots zeigen für eine bestimmte Resonanzbreite bis zu einer kritischen Barrierendicke eine vollständige Transmission. Jedoch ist diese Linie mit vollständiger Transmission im \mathbf{k}_{\parallel} aufgelösten Leitwert für die Integration unbedeutend, da sie vom Maß Null ist. Wichtig ist dagegen der große Bereich um die Hot Spots, der im analytischen Modell mit “Übergang zum verstärkten Tunneln” bezeichnet wurde und der eine im Vergleich zum Tunnelprozess um mehrere Größenordnungen höhere Transmission aufweist.

- *Warum treten die Hot Spots in allen bekannten Rechnungen nur im Minoritätsband auf?*

Da die Grenzflächenzustände stets energetisch unterhalb der Bandminima liegen, wird eine mehrbandige Fermifläche benötigt, damit der Grenzflächenzustand resonant an ein anderes Band ankoppeln kann. Dieses wurde im analytischen Modell gezeigt. Dort ist der Grenzflächenzustand unterhalb des unteren Bandes lokalisiert und kann nicht am Stromtransport teilnehmen. In den bekannten *ab initio* Rechnungen, z.B. [21, 28], bestehen die Majoritätsbänder im Bereich der Fermienergie aus einem einzigen *sp* Band, so dass resonante Grenzflächenzustände nicht erwartet werden. Dagegen existieren im Minoritätsband mehrere Fermiflächen, so dass der Grenzflächenzustand resonant an propagierende Zustände in den Elektroden koppeln kann.

- *Warum sind die Hot Spots so empfindlich auf leichte Asymmetrien?*

Die Grenzflächenzustände haben eine sehr kleine Resonanzbreite, und ihre Aufspal-

tung ist ebenfalls sehr klein im Vergleich zur Größe der zweidimensionalen Brillouinzone. Daher wird die Resonanzbedingung für das kohärente Hüpfen schon durch geringe Störungen der Grenzflächensymmetrie nicht mehr erfüllt, z.B. bei asymmetrischen Grenzflächen, bei einer Grenzflächenrauhigkeit oder bei einer energetischen Verschiebung der Zustände durch eine angelegte Bias-Spannung. Dieses konnte für verschiedene symmetrische und asymmetrische Grenzflächen in den *ab initio* LMTO Rechnungen gezeigt werden.

Zusätzlich zu diesen Antworten wurden einige Eigenschaften wie z.B. die Abhängigkeit der Aufspaltung von der Barrierendicke bei konstanter Resonanzbreite mit dem analytischen Modell vorhergesagt und mit den *ab initio* Rechnungen verifiziert.

Damit wurde gezeigt, dass das einfache analytische Modell ausreicht, um die Eigenschaften und Ursachen der Hot Spots zu beschreiben. Wichtig dafür ist, dass das Modell nicht rein eindimensional ist, da ansonsten keine mehrbändige Fermifläche vorliegt. Aus diesem Grund wurde ein Kristallpotential mit einer x - y Abhängigkeit in der Grenzflächenebene zugelassen. Dieses Kristallpotential führt zu zwei Bändern, die an der Grenzfläche infolge der Brechung der z -Periodizität koppeln können. Grenzflächenzustände sind wichtig, da aus ihnen die Hot Spots, also die bindenden und antibindenden Hybride, gebildet werden. Dieses wurde mit anziehenden δ -förmigen Potentialen an beiden Grenzflächen erreicht, die gebundene bzw. resonante Zustände unterhalb der Bandminima erzeugen.

Es wurde gezeigt, dass die Hot Spots numerisch sehr schwierig zu behandeln sind, da sie nur einen Bruchteil von weniger als 0.05% der zweidimensionalen Brillouinzone einnehmen, aber einen Großteil des gesamten Leitwertes tragen. Daher werden um Größenordnungen mehr \mathbf{k}_{\parallel} Vektoren benötigt als bei Rechnungen ohne Hot Spots, wie z.B. im Majoritätsband. Deshalb wurden einige Anstrengungen unternommen, die in zwei Klassen einteilbar sind: die korrekte numerische Beschreibung der Hot Spots und die Unterdrückung der Hot Spots durch eine Grenzflächenrauhigkeit. Eine Möglichkeit die Hot Spots numerisch besser zu beschreiben, aber dennoch auf sehr viele \mathbf{k}_{\parallel} Vektoren zu verzichten, wurde von J. Henk [93] vorgeschlagen: Es wird kein äquidistantes \mathbf{k}_{\parallel} Gitternetz verwendet, sondern ein sich selbst verdichtendes, dynamisches \mathbf{k}_{\parallel} Netz, das weitere \mathbf{k}_{\parallel} Punkte an den Stellen einfügt, wo das vorherige \mathbf{k}_{\parallel} Netz zu grob war, d.h. in der Nähe der Hot Spots. Die andere Klasse nutzt die Tatsache aus, dass die Hot Spots symmetrische Grenzflächen benötigen, um den integrierten Leitwert zu bestimmen. Wird eine Grenzflächenrauhigkeit beschrieben, entweder durch große Superzellen oder durch chemische Unordnung mittels CPA¹², so verschwinden die Hot Spots und sind für den integrierten Leitwert unbedeutend. Dieses entspricht auch mehr den zur Zeit herstellbaren TMR Strukturen. Bei der Superzellenmethode werden viele verschiedene Grenzflächenrauhigkeiten in einer planaren Superzelle berücksichtigt und anschließend ein Mittelwert über die verschiedenen Konfigurationen gebildet. Dieses setzt viele aufwendige Rechnungen voraus, erlaubt aber eine einfache Berechnung des Leitwertes. Bei der CPA Methode wird die chemische Unordnung über gemittelte Streupfadoperatoren τ beschrieben, wodurch schon alle möglichen Konfigurationen berücksichtigt werden. Allerdings müssen bei der Berechnung des Leitwertes aufwendige Korrekturen durchgeführt

¹²Englisch: *Coherent Potential Approximation*

werden, die durch die Mittelung über die verschiedenen Konfigurationen entstehen¹³.

Wie bereits erwähnt wurde, müssen ideale oder nahezu ideale Grenzflächen vorliegen, damit die Hot Spots den integrierten Leitwert im Minoritätsband bestimmen. Dadurch wird die experimentelle Beobachtung der Hot Spots erschwert, da schon eine kleine Grenzflächenrauigkeiten die Hot Spots zerstören. Weiter wird in Experimenten der Leitwert nicht k_{\parallel} aufgelöst, sondern nur der integrierte Wert gemessen. Daher ist auch bei sehr idealen Grenzflächen der eindeutige Nachweis aufwendig.

Dennoch zeigen die Hot Spots ein sehr interessantes Phänomen, das mit Hilfe des analytischen Modells anschaulich verständlich gemacht wurde. Ist bereits das Tunneln durch Barrieren klassisch unverständlich, so gilt dies insbesondere für Elektronen in den Zuständen der Hot Spots, die im Prinzip jede, noch so beliebig dicke Barriere komplett ignorieren und ohne Intensitätsverlust durchdringen können.

¹³Englisch: *Vertex corrections*

Kapitel 6

Ballistische Spininjektion

In diesem Kapitel wird die ballistische Spininjektion, d.h. die Erzeugung eines spinpolarisierten Stromes in einem Halbleiter, von Fe in ZnSe und GaAs für die (001), (111) und (110) Wachstumsorientierung untersucht. Es wird gezeigt, dass in der (001) Richtung eine sehr hohe Spinpolarisation von nahezu 100% erreicht werden kann. Dieses wird durch die Symmetrieunterschiede der Fe Zustände an der Fermienergie für Majoritäts- und Minoritätselektronen hervorgerufen. Daher wird dieser Effekt symmetriebedingte hohe Spinpolarisation genannt. Für die anderen untersuchten Orientierungen kann kein Symmetrieunterschied und daher keine hohe Spinpolarisation festgestellt werden. Daher wird der Schwerpunkt in diesem Kapitel auf die (001) Orientierung gelegt.

Nach einer Einleitung in die Spininjektion und die hier betrachtete ballistische Spininjektion wird der spinpolarisierte Transport in der Fe/HL(001) Heterostruktur detailliert diskutiert. In diesem Kapitel steht HL für die beiden Halbleiter ZnSe und GaAs. Anschließend werden noch die (111) und (110) Orientierungen betrachtet. Die Ergebnisse des Kapitels werden im letzten Abschnitt zusammengefasst und diskutiert.

6.1 Einleitung

Im Gegensatz zur Magnetoelektronik, bei der der Spin des Elektrons ein zusätzlicher Freiheitsgrad ist, spielt der Spin in der Spinelektronik [3] die eigentliche Hauptrolle. Er ist der Freiheitsgrad, der die Information transportiert, speichert und direkt manipuliert wird. Daher bilden die Halbleiter (HL) in der Spinelektronik wie in der Mikroelektronik die wichtigste Materialklasse, da sie den Transport des Spins über mehr als 100 Mikrometer bei Raumtemperatur erlauben [12, 13], was für Anwendungen ausreichend ist. Dies gilt allerdings nur für Elektronen im Leitungsband (LB). In Experimenten wurde nachgewiesen [12, 13], dass die Spinkohärenzlänge von Elektronen mehr als drei Größenordnungen größer ist als die von Löchern im Valenzband (VB). Da das VB p - und das LB s -artig ist, ist die Spin-Bahn-Wechselwirkung im VB wesentlich größer als im LB. Weil man an einer langen Spinkohärenz der Ladungsträger in Anwendungen interessiert ist, sind die Elektronen im LB von besonderem Interesse. Daher wird in dieser Arbeit wie zum größten Teil auch in

der Literatur nur die Spinelektronik von Elektronen im LB untersucht.

Elektronen können auf unterschiedliche Art und Weise in das LB angeregt werden, z.B. durch Dotierung mit Donatoren, die Elektronen bei thermischer Ionisierung an das LB abgeben oder durch Anlegen einer positiven Gate-Spannung im Feld-Effekt-Transistor, wodurch das LB zur Fermienergie hin verbogen wird. Schließlich ist auch eine optische Anregung von Elektronen aus dem VB in das LB möglich.

Das als erstes vorgeschlagene Bauteil der Spinelektronik, der Spintransistor von Datta und Das [11], beschreibt ein elektronisches Analogon zum elektro-optischen Modulator und wird oft als Startpunkt der Spinelektronik angesehen. Inzwischen sind noch weitere mögliche Anwendungen veröffentlicht worden, aber es herrscht die Meinung, dass das volle Leistungspotential der Spinelektronik noch nicht abzusehen ist. Deshalb wird zur Zeit noch an den elementaren Puzzleteilen geforscht, um später daraus leistungsfähige und neue Spinelektronik-Bauteile zu erschaffen. Diese grundlegenden Erfordernisse sind: die Injektion eines spinpolarisierten Stromes in einen HL, der Transport des Spins im HL über möglichst weite Strecken, die effektive und schnelle Manipulation des Spins und schließlich die Detektion der Spininformation. Während der Transport [12, 13, 94] und die Manipulation ([95] und Referenzen darin) des Spins schon experimentell nachgewiesen wurden, konnte die Spininjektion noch nicht für Anwendungen befriedigend realisiert werden.

Es gibt zwar einige Methoden, einen spinpolarisierten Strom in einem HL zu erzeugen, jedoch eignen sich diese meist mehr für die Grundlagenforschung als für die Anwendung: die Bestrahlung des HL mit zirkular polarisiertem Licht bei einer angelegten Bias-Spannung [12, 96], die Spininjektion von einer ferromagnetischen Raster-Tunnel-Mikroskop Spitze [97, 98] oder von einem paramagnetischen HL mit einem hohen äußeren Magnetfeld in einen nichtmagnetischen HL [99, 100]. Besser geeignet erscheint die Injektion von einem verdünnten ferromagnetischen HL¹ (DMS) in einen nichtmagnetischen HL [101], obwohl die Curietemperaturen von DMS bislang noch weit unterhalb der Raumtemperatur liegen. Daher wäre es vorteilhaft, die Spininjektion von einem gewöhnlichen Ferromagneten (FM) mit einer hohen Curietemperatur, wie z.B. Fe, in einen nichtmagnetischen HL realisieren zu können.

Diffusive Spininjektion von Ferromagneten in Halbleiter

Es wird zunächst die *diffusive* Spininjektion betrachtet. Schmidt und Mitarbeiter [33] konnten zeigen, dass bei der diffusiven Spininjektion von einem metallischen FM in einen nichtmagnetischen HL aufgrund des Leitfähigkeitsunterschiedes zwischen dem FM und dem HL die erreichbare Spinpolarisation extrem klein ist. Dies gilt, solange die Spinpolarisation im FM nicht nahezu 100% beträgt, d.h. ferromagnetische Halbmetalle (z.B. Heusler-Legierungen) benutzt werden. Dieser Umstand wurde daher auch "fundamentales Hindernis"² genannt [33]. In Abbildung 6.1 wird dies anhand eines schematischen Widerstandsmodells für eine Ferromagnet/Halbleiter/Ferromagnet Struktur verdeutlicht. Der nichtmagnetische HL besitzt im Gegensatz zur ferromagnetischen Elektrode einen spinunabhängigen

¹Englisch: *Diluted Magnetic Semiconductor*

²Englisch: *Fundamental obstacle*

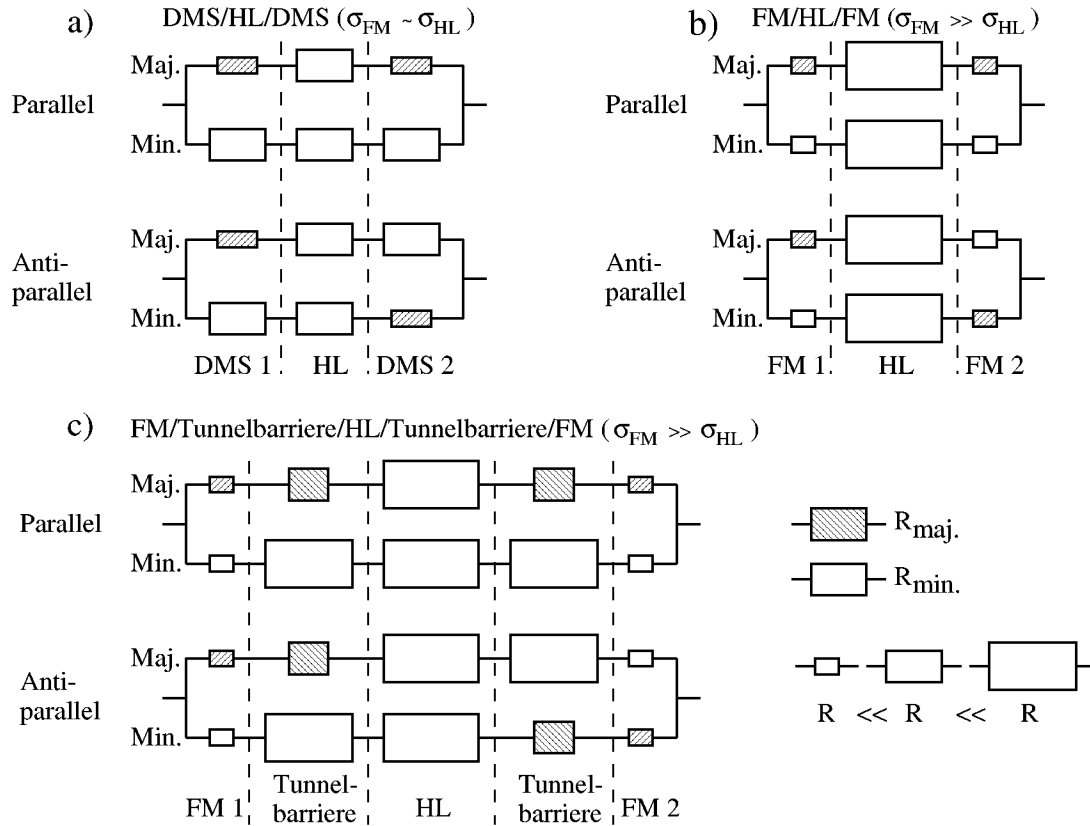


Abbildung 6.1: Ursprung des “fundamentalen Hindernisses” bei der diffusiven Spininjektion im Widerstandsmodell (nach [33]). Es sind folgende Widerstandsmodelle gezeigt: Modell a) Spininjektion von einem verdünnten ferromagnetischen Halbleiter (DMS) in einen nichtmagnetischen Halbleiter (HL). Modell b) Spininjektion von einem metallischen Ferromagneten (FM) in einen nichtmagnetischen HL. Modell c) Spininjektion von einem metallischen FM in einen nichtmagnetischen HL mit einer spinabhängigen Tunnelbarriere an der Grenzfläche. Dargestellt sind die Schichtwiderstände für Majoritäts- (offen) und Minoritätselektronen (schraffiert). Die Größe der Widerstandssymbole entspricht schematisch der Größe des Widerstandes. Die magnetischen Momente der ferromagnetischen Elektroden sind parallel (jeweils obere Zeile) bzw. antiparallel (untere Zeile) ausgerichtet. σ bezeichnet die Leitfähigkeit des entsprechenden Materials.

Widerstand. Das Widerstandsmodell a) gibt den Fall wieder, dass die Leitfähigkeiten der drei Schichten vergleichbar sind, z.B. bei der Spininjektion von einem DMS in einen nichtmagnetischen HL. Dabei ergeben sich unterschiedliche Widerstände für Majoritäts- (oberer Stromweg) und Minoritätselektronen (unterer Stromweg) bei einer parallelen Ausrichtung der magnetischen Momente in den FM, d.h. es kann von einem DMS ein spinpolarisierter Strom in einen nichtmagnetischen HL injiziert werden. Bei einer antiparallelen Ausrichtung der magnetischen Momente sind beide Widerstände gleich groß, und es gibt keine Spinpo-

larisation im HL. Im Modell b) ist die Spininjektion von einem metallischen FM wie Fe in einen nichtmagnetischen HL skizziert. Da die Leitfähigkeit von Metallen viel größer als die von HL ist, sind die Widerstandsunterschiede zwischen Majoritäts- und Minoritätselektronen im FM im Vergleich zum Gesamtwiderstand und somit auch die Spinpolarisation im HL vernachlässigbar. Dabei ist nicht der Widerstand der gesamten Fe oder HL Schicht wichtig, sondern nur der einer dünnen Schicht von der Dicke der Spin-Flip-Länge, also etwa 10nm im Fe und etwa $1\mu\text{m}$ im HL. Erst für eine nahezu 100 prozentige Spinpolarisation des FM entstehen merklich unterschiedliche Widerstände für Majoritäts- und Minoritätselektronen und somit ein spinpolarisierter Strom im HL. Die ersten Experimente [29–32] zur Spininjektion von einem FM in einen HL erreichten wegen des “fundamentalen Hindernisses” keine oder extrem kleine Spinpolarisationen, oder die Messergebnisse kamen aufgrund anderer Effekte zustande (z.B. durch den Halleffekt aufgrund magnetischer Streufelder).

Bei dem “fundamentalen Hindernis” wurde allerdings angenommen, dass die Grenzfläche stets ohmisch und spinunabhängig ist. Rashba [34] und zeitgleich Fert und Jaffrès [35] konnten theoretisch zeigen, dass mit einem spinabhängigen, hohen Grenzflächenwiderstand, z.B. mit einer Tunnel- oder Schottkybarriere, das “fundamentale Hindernis” überwunden werden kann. Dieser Fall ist in Abbildung 6.1 im Widerstandsmodell c) gezeigt, bei dem eine spinabhängige Tunnelbarriere mit einem hohen Widerstand zwischen dem FM und dem HL eingefügt ist. Daher wird der Gesamtwiderstand von dem spinabhängigen Grenzflächenwiderstand bestimmt, und es fließt ein spinpolarisierter Strom im HL. Inzwischen wurde die Spininjektion durch eine intrinsischen Schottkybarriere [36, 37, 102] und durch eine extrinsischen Tunnelbarriere, wie Al_2O_3 [103, 104], experimentell nachgewiesen.

6.1.1 Experimenteller Nachweis der Spininjektion

In diesem Abschnitt wird der experimentelle Aufbau vorgestellt, mit dem bereits erfolgreich spinpolarisierte Ströme nachgewiesen werden konnte [36, 37, 102]. Dabei entspricht die Situation in diesen Experimenten dem in diesem Kapitel betrachteten Prozess der thermischen Spininjektion in Fe/GaAs(001) Heterostrukturen mit einer Schottkybarriere an der Grenzfläche. Die Ergebnisse der Experimente werden in der Zusammenfassung dieses Kapitels diskutiert.

Der schematische Aufbau zum Nachweis eines spinpolarisierten Stromes, wie er in den Experimenten [36, 37, 102] benutzt wurde, ist in Abbildung 6.2 gezeigt. Dies ist im wesentlichen der Aufbau einer lichtemittierenden Diode³ (LED), wobei der wesentliche Unterschied darin besteht, dass eine ferromagnetische Topelektrode verwendet wird. Das Substrat ist *p*-dotiert, z.B. *p*-GaAs(001), auf dem die aktive Region, ein Quantentrog, aufgebracht wird. Dieser entspricht in den analytischen Modellen [33–35] einer zweiten ferromagnetischen Elektrode ohne Tunnelbarriere [105]. Auf die aktive Region wird eine dünne *n*-dotierte HL Schicht und anschließend die ferromagnetische Topelektrode abgeschieden. In der Skizze sind der Einfachheit halber alle zusätzlich benötigten Schichten, wie Bufferschichten, Abdeckschichten oder Keimschichten, nicht eingezeichnet.

³Englisch: *Light Emitting Diode*

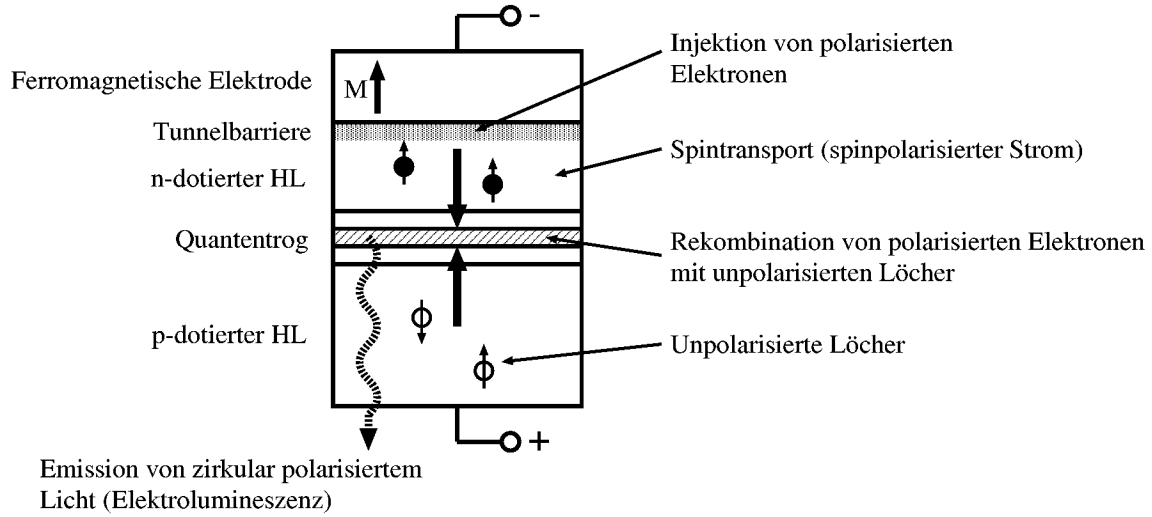


Abbildung 6.2: Schematischer Schichtaufbau beim optischen Nachweis der Spinpolarisation bei einer Injektion von einem Ferromagneten in einen Halbleiter (HL) mit einer Tunnelbarriere an der Grenzfläche. Zwischen der oberen ferromagnetischen Elektrode und dem unteren Substrat wird eine Bias Spannung in Gegenrichtung angelegt. Das zirkular polarisierte Licht wird senkrecht zur Schichtebene und parallel zur Magnetisierung des Ferromagneten detektiert (Faraday Geometrie).

Wird eine Bias-Spannung in Sperrrichtung zwischen der oberen Elektrode und dem Substrat angelegt, so fließen Elektronen von oben und Löcher von unten in den Quantentrog, wo sie beim Rekombinieren Licht ausstrahlen (Elektrolumineszenz). Die hier betrachteten Experimente werden in der Faraday Geometrie [106] durchgeführt, d.h. die Magnetisierungsrichtung der Topelektrode zeigt in dieselbe Richtung wie das ausgestrahlte Licht detektiert wird, nämlich senkrecht zu den Schichtebenen (siehe Abbildung 6.2).

Die Spinpolarisation der Elektronen wird definiert als die relative Besetzungsdifferenz der Leitungsbandzustände für Majoritäts- (n^\uparrow) und Minoritätselektronen (n^\downarrow)

$$P_{\text{spin}} = \frac{n^\uparrow - n^\downarrow}{n^\uparrow + n^\downarrow}. \quad (6.1)$$

Die zirkulare Polarisation der Lumineszenz ist

$$P_{\text{opt}} = \frac{\sigma^+ - \sigma^-}{\sigma^+ + \sigma^-}, \quad (6.2)$$

wobei σ^+ die Intensität des ausgestrahlten Lichts mit einer rechtsdrehenden und σ^- die mit einer linksdrehenden zirkularen Polarisation ist. Sie wird mit Hilfe einer $\lambda/4$ Platte und einem linearen Polarisationsfilter gemessen. Die Magnetisierung der oberen, ferromagnetischen Elektrode liegt ohne Magnetfeld aufgrund der magnetischen Formanisotropie in der Ebene (leichte Achse). Durch ein äußeres Magnetfeld senkrecht zur Schichtebene wird die Magnetisierung ausgerichtet.

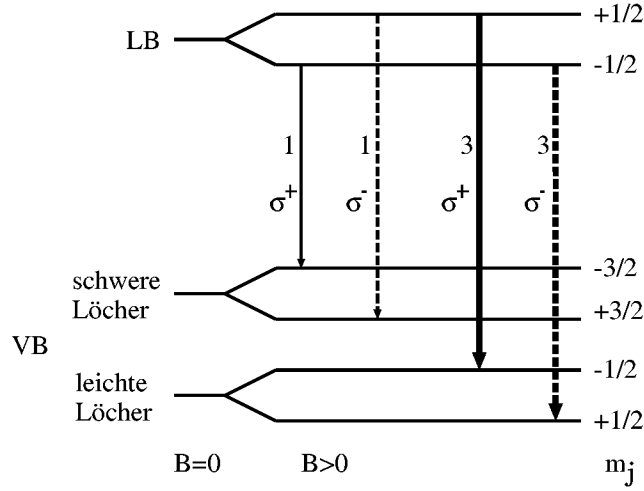


Abbildung 6.3: Zustände des Leitungs- und des Valenzbandes im Quantentrog am $\bar{\Gamma}$ Punkt. Eingezeichnet sind die erlaubten Übergänge und deren relative Übergangswahrscheinlichkeiten für ins LB injizierte Elektronen und die daraus resultierende zirkulare Polarisation (σ^+ , σ^-) des ausgestrahlten Lichts [107]. Die Energieniveaus sind nicht maßstabsgerecht gezeichnet. Das *split-off* Band liegt energetisch tiefer.

Aus der Polarisation des Lichtes kann auf die Spinpolarisation der Elektronen geschlossen werden. Wichtig dabei ist die Frage, ob die thermische Energie größer oder kleiner als die Aufspaltung des schweren und des leichten VB ist. Eine solche Aufspaltung kann durch eine biaxiale Verformung oder Einsperrung, wie es in einem Quantentrog der Fall ist, erzeugt werden [99]. Das Spin-Bahn *split-off* VB Band liegt in Bulk⁴ GaAs am Γ Punkt etwa 0.34eV tiefer [107] und ist daher in den Experimenten unwichtig. Die Energieniveaus im Quantentrog am $\bar{\Gamma}$ Punkt, d.h. in der Mitte der zweidimensionalen Brillouinzone, sowie die erlaubten Übergänge mit deren relativen Übergangswahrscheinlichkeiten sind in Abbildung 6.3 dargestellt. Die Polarisationsrichtung des ausgestrahlten Lichts bei der Rekombination ist mit σ^+ und σ^- bezeichnet. Ist die thermische Energie kleiner als die Aufspaltung des schweren und des leichten VB, so sind nur die Zustände der schweren Löcher besetzt, und es ergibt sich ein einfacher Zusammenhang zwischen der Spinpolarisation der Elektronen P_{spin} und der optischen Polarisation P_{opt}

$$P_{\text{opt}} = \frac{\sigma^+ - \sigma^-}{\sigma^+ + \sigma^-} = \frac{n^\uparrow - n^\downarrow}{n^\uparrow + n^\downarrow} = P_{\text{spin}}. \quad (6.3)$$

Ist die Aufspaltung dagegen kleiner, so müssen auch Übergänge ins leichte VB berücksichtigt werden. Da Übergänge vom LB ins leichte VB um den Faktor 3 wahrscheinlicher sind

⁴Volumenkristall

[107] als solche ins schwere VB ergibt sich

$$P_{\text{opt}} = \frac{\sigma^+ - \sigma^-}{\sigma^+ + \sigma^-} = \frac{(3n^\uparrow + n^\downarrow) - (3n^\downarrow + n^\uparrow)}{(3n^\uparrow + n^\downarrow) + (3n^\downarrow + n^\uparrow)} = \frac{1}{2} P_{\text{spin}} \quad (6.4)$$

Somit kann bei einem 100% spinpolarisierten Strom nur eine maximale optische Polarisation von 50% erreicht werden. Diese einfachen Abhängigkeiten gelten nur für die hier betrachtete Faraday Geometrie und exakt nur am $\bar{\Gamma}$ Punkt, d.h. in der Mitte der zweidimensionalen Brillouinzone ($\mathbf{k}_{\parallel} = 0$).

Bei unpolarisierten Elektronen, d.h. wenn ihre Spinrichtung statistisch gleichverteilt ist, oder bei einer Magnetisierungsrichtung des FM in der Schichtebene, ist das ausgesendete Licht unpolarisiert (die Löcher sind in den Experimenten stets unpolarisiert). Sind dagegen die Elektronen senkrecht zur Schichtebene spinpolarisiert, so ist das Licht, je nachdem, welcher Spinzustand stärker besetzt ist, links oder rechtsdrehend zirkular polarisiert.

Die gemessene Spinpolarisation der Elektronen im Quantentrog ist eine untere Schranke für die Spinpolarisation des Stromes an der Grenzfläche zwischen dem FM und dem HL, da die Polarisation der Elektronen auf dem Weg zum Quantentrog durch Spinrelaxation und Elektron-Loch Rekombination abnimmt. Besonders im Quantentrog ist die Spinrelaxation wegen der Wechselwirkung mit den schnell spindephasierenden Löchern groß. Weiter ist bei der Bestimmung der optischen Polarisation wichtig, dass nur die Elektrolumineszenzlinie aus der freien Elektron-Loch Rekombination in dem Quantentrog zur Bestimmung der Spinpolarisation herangezogen wird. Es konnte gezeigt werden [108], dass andere Linien einen falschen Wert und sogar ein falsches Vorzeichen der Spinpolarisation liefern können.

Weiter können noch zirkulare Polarisationen des Lichtes gemessen werden, die nicht von einem spinpolarisierten Strom verursacht wurden: wird das Licht durch die ferromagnetische Schicht detektiert, wird es durch den Faraday Effekt zirkular polarisiert. Dieser Effekt erzeugt aber bei den dünnen Fe Schichten eine nur kleine Polarisation von etwa 1% [102]. Daneben werden die Elektronen in dem Quantentrog spinpolarisiert, sobald die Zeeman-Aufspaltung $\Delta E_Z = \mu_B g B$ (μ_B : Bohrsches Magneton, g : Landé Faktor des Materials, B : angelegtes Magnetfeld) größer als die thermische Energie ist. Diesen meistens kleinen Effekt ist durch einen Untergrund in der optischen Polarisation in Abhängigkeit des angelegten Magnetfeldes erkennbar (siehe Ref. [36]). Anhand der Zeemanaufspaltung kann im Prinzip auf die Richtung der injizierten Spins geschlossen werden, da durch die Aufspaltung mehr und mehr der energetisch tiefere Spinzustand des LB besetzt wird. Dabei muss allerdings berücksichtigt werden, dass der Landé-Faktor aufgrund von Spin-Bahn-Wechselwirkungen auch negative Werte annehmen kann. So wurde im Bulk GaAs und in einem GaAs Quantentrog für Elektronen ein negativer Landé Faktor von etwa -0.4 gemessen [109, 110], d.h. die Zustände für Minoritätselektronen liegen energetisch tiefer als die für Majoritätselektronen (siehe Abbildung 6.3). In Ref. [36] kann beobachtet werden, dass die optische Polarisation aufgrund der Zeemanaufspaltung dasselbe Vorzeichen wie die optische Polarisation durch den spinpolarisierten Strom besitzt. Da der Landé-Faktor vom GaAs-Quantentrog negativ ist, kann daher vermutet werden, dass die Spinpolarisation negativ ist, d.h. dass hauptsächlich Minoritätselektronen injiziert werden. Dieses wurde später durch weitere Studien belegt [111].

6.1.2 Ballistische Spininjektion

Bisher wurde die diffusive Spininjektion betrachtet, d.h. die Elektronen bewegen sich mit einer mittleren Driftgeschwindigkeit durch den Kristall und stehen im Gleichgewicht zwischen Energieaufnahme durch das angelegte elektrische Feld und Energieabgabe durch inelastische Stöße und Rückklappprozesse. Bei tiefen Temperaturen und sehr kleinen Probengrößen, d.h. wenn die mittlere freie Weglänge zwischen zwei inelastischen Stößen größer wird als die Probenabmaße, kann der elastische Stromtransport erreicht werden. Hierbei werden die Elektronen nur noch an den vielen statistisch verteilten Störstellen inkohärent und elastisch gestoßen, wobei die Phasenbeziehung der Elektronen verloren geht. Bei reinen Proben können sich die Elektronen ballistisch, d.h. ohne inelastische oder inkohärente Stöße, durch den Kristall bewegen. Zum Beispiel ist die Durchquerung einer Tunnelbarriere oder einer dünnen Schottkybarriere bei nicht zu hohen Temperaturen in der Regel ballistisch.

In dieser Arbeit wird die ballistische Spininjektion von Fe in die HL ZnSe und GaAs untersucht. Diese Heterostrukturen sind besonders interessant, da bcc-Fe epitaktisch auf die fcc-HL Struktur gewachsen werden kann. Hier werden in (001), (111) und (110) orientierte Heterostrukturen diskutiert. Die ballistische Spininjektion unterscheidet sich sehr von der diffusiven Spininjektion. So gibt es zum Beispiel im ballistischen Grenzfall kein "fundamentales Hindernis", da die als ideal angenommenen Bulk Fe und Bulk HL Elektroden den Strom perfekt leiten (Transmission 1) und somit einen Leitwert in derselben Größenordnung besitzen. Die Elektronen werden nur ballistisch an der Fe/HL Grenzfläche reflektiert.

Einen weiteren Effekt bei der ballistischen Spininjektion konnte Kirczenow [112] zeigen. Einige FM/HL Heterostrukturen, wie z.B. fcc-Ni/InAs(111) oder fcc-Co/ZnTe(111), können wie 100 prozentige Spinfilter wirken. Dies ist der Fall, wenn an der Fermienergie im Bereich der zweidimensionalen Brillouinzone (2DBZ), in dem der HL besetzte Zustände aufweist, im FM nur Zustände für eine Spinrichtung vorhanden sind. Das bedeutet, dass nur Zustände mit dieser Spinrichtung den Strom transportieren können, da für die andere Spinrichtung keine propagierenden Zustände im HL existieren. Dieses Kriterium wird von einigen FM/HL Heterostrukturen erfüllt, da im HL nur ein sehr kleiner Bereich der 2DBZ besetzt wird. Damit dieser Effekt auftritt, muss die Grenzfläche eine perfekte zweidimensionale Translationssymmetrie aufweisen, so dass die Komponente des reziproken Vektors parallel zur Grenzfläche \mathbf{k}_{\parallel} beim Passieren der Grenzfläche erhalten bleibt. Wie Kirczenow [112] mit Modellrechnungen zeigen konnte, geht der Spinfiltereffekt bei einer Grenzflächenrauigkeit verloren. Die hier diskutierten Materialsysteme Fe/ZnSe und Fe/GaAs erfüllen allerdings nicht das Kriterium von Kirczenow für die 100 prozentige Spinpolarisation, da im Bulk Fe der Bereich um den $\bar{\Gamma}$ Punkt für beiden Spinrichtungen besetzt ist. Im ZnSe und GaAs sind für nicht allzu hohe Energien nur propagierende Zustände um den $\bar{\Gamma}$ Punkt vorhanden, da sie direkte HL sind. Um den Spinfiltereffekt von Kirczenow zu erklären, wird die Symmetrie der Wellenfunktionen nicht benötigt, sondern nur die Besetzung der Zustände an der Fermienergie in der 2DBZ, also die Projektion der Fermifläche auf die 2DBZ.

Für die ballistische Spininjektion von einem FM wie Fe in einen HL existieren zwei Arten von theoretischen Studien: analytische und *ab initio* Rechnungen. Bei den analytischen Rechnungen [113–115] werden die Elektronen im FM und im HL im effektiven Massenmodell und mit ebenen Wellen beschrieben. Dabei werden die Symmetrien der Wellenfunktionen, insbesondere die der d Bänder des FM, nicht berücksichtigt. Dagegen beinhalten *ab initio* Rechnungen [116–118] sowohl die Symmetrie der Wellenfunktionen als auch die volle Komplexität der Bandstruktur des FM und der FM/HL Grenzfläche. Während die analytischen Modelle nur einige Prozent Spinpolarisation ergeben, wird in dieser Arbeit gezeigt, dass bei Berücksichtigung der Symmetrie der Wellenfunktionen Spinpolarisationen bis nahezu 100% erreicht werden können. Dieser Effekt wird daher in dieser Arbeit “symmetriebedingte hohe Spinpolarisation” genannt, da auch Spinpolarisationen durch unterschiedlich starke Kopplungen der Majoritäts- und Minoritätszustände des FM an das HL LB an der Grenzfläche entstehen können. Während eine symmetriebedingte hohe Spinpolarisation durch die Symmetrien der Bulk Wellenfunktionen hervorgerufen wird, sind die mehr “zufälligen” Spinpolarisationen von der Eigenschaft der Grenzfläche und typischerweise auch stark von der Energie abhängig.

6.1.3 Modellierung und Rechnungsdetails

Die Fe/HL Heterostrukturen bestehen aus zwei Halbräumen, Bulk Fe und Bulk HL, deren Eigenschaften mit Hilfe der Dezimationstechnik bestimmt werden (siehe Kapitel 3.5.2). Dazwischen befindet sich die Fe/HL Grenzfläche, die durch einige Monolagen (ML) Fe und HL beschrieben wird. Diese Potentiale werden aus einer selbstkonsistent bestimmten Fe/HL/Fe Struktur herausgeschnitten und werden im Folgenden nicht verändert, da sie von der Grenzfläche bestimmt werden. Auf der HL Seite werden noch bis zu 80 ML Bulk HL Potentiale angefügt, um evaneszente Blochwellen in der Bandlücke auszudämpfen. Sie treten ansonsten fälschlicherweise im Leitwert auf (siehe Anhang B).

Bei der Berechnung des Leitwertes wird die wichtige Annahme gemacht, dass die zweidimensionale Translationssymmetrie in der Grenzfläche erhalten bleibt. Somit ist die parallel zur Grenzfläche liegende Komponente des Wellenvektors \mathbf{k}_{\parallel} eine gute Quantenzahl, d.h. der \mathbf{k}_{\parallel} Vektor bleibt beim Passieren der Grenzfläche erhalten. Damit numeriert der \mathbf{k}_{\parallel} Vektor die Stromkanäle, und der Leitwert G kann in Abhängigkeit von \mathbf{k}_{\parallel} angegeben werden (siehe Kapitel 4). Um diese perfekte zweidimensionale Translationssymmetrie an der Grenzfläche zu erhalten, werden die Fe und die HL Halbräume aufeinander angepasst, wobei die HL Gitterkonstante etwas auf die doppelte Gitterkonstante von Bulk Fe gedehnt wird: $d_{\text{HL}} = 2 d_{\text{Fe}} = 2 \times 5.425$ a.u. So wird die bcc-Fe Struktur ideal im HL fortgesetzt, wobei im HL die Hälfte der bcc Positionen mit Leerstellen besetzt wird, um die Zinkblende Struktur des HL zu erhalten. Die lokale Atomanordnung besitzt daher eine bcc-artige Struktur, was z.B. die Größe des TB-Clusters bestimmt (hier: 65 Atome im TB Cluster), aber die Translationssymmetrie ist durch die fcc Einheitszelle der Zinkblende Struktur gegeben, die die Form der Brillouinzone (BZ) und die Symmetrieeigenschaften bestimmt. Durch die Gitteranpassung wird der HL gegenüber der Bulk Gitterkonstante um 1.3% für ZnSe und um 1.6% für GaAs gestreckt (eine tetragonale Verzerrung senkrecht zur Grenz-

fläche, um das Zellvolumen konstant zu halten, wird vernachlässigt). Daraus resultiert eine kleinere Bandlücke [119] als für eine Bulk Gitterkonstante (das Valenzbandmaximum und das Leitungsbandminimum liegt bei ZnSe und GaAs am Γ Punkt). Generell ist die in lokaler Dichtenäherung berechnete Bandlücke etwa um die Hälfte kleiner als die experimentell gemessene [120]. Dieser Fehler hat in den hier präsentierten Rechnungen keinen großen Einfluss, da sich dadurch die Symmetrien der Bänder nicht ändern. Lediglich die exponentielle Abfallkonstante für Zustände in der Bandlücke ist kleiner als bei einer korrekten, größeren Bandlücke.

Die Potentiale werden mit sphärischen ASA Potentialen beschrieben, aber die Elektronendichte wird in den Atomkugeln vollständig nach ℓm Komponenten entwickelt. Für die Grundzustandsrechnungen wird ein $\ell_{max} = 2$ und für die Leitwertberechnungen ein $\ell_{max} = 3$ verwendet. Der Leitwert wird wie in Kapitel 4 beschrieben für die Majoritäts- (G^\uparrow) und Minoritätselektronen (G^\downarrow) berechnet. Daraus berechnet sich die Spinpolarisation zu

$$P_{\text{spin}} = \frac{G^\uparrow - G^\downarrow}{G^\uparrow + G^\downarrow}. \quad (6.5)$$

Im Landauer-Büttiker Formalismus werden die Stromkanäle, über die die Transmissionswahrscheinlichkeiten summiert werden, von der Bulk Bandstruktur in den Elektroden bestimmt (siehe Kapitel 4). Somit ist es sehr wichtig zu wissen, welche Bulk Bänder in den beiden Halbräumen zur Verfügung stehen. Da hier nicht die Bulk Einheitszelle, sondern eine an die Lagengeometrie angepasste und dazu im Fe Halbraum doppelt so große Einheitszelle verwendet wird, werden zuerst die 2DBZ der beiden Halbräume untersucht. Dabei wird besonders der $\bar{\Gamma}$ Punkt, d.h. die Mitte der 2DBZ, betrachtet, da er, wie weiter unten gezeigt wird, für die ballistische Spininjektion besonders wichtig ist. Durch die im Vergleich zur Bulk BZ kleinere 2DBZ können Bänder von der Brillouinzonengrenze zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet werden. Physikalisch bedeuten die zurückgefalteten Bänder einen Phasenunterschied der Blochwellen an den Atompositionen in der zweidimensionalen Einheitszelle. Da die 2DBZ nur eine andere Aufteilung des reziproken Raumes darstellt, können die zurückgefalteten Bänder bestimmten Bänder in der Bulk BZ zugeordnet werden. Bei der Zuordnung zeigten sich dreidimensionale Modelle der fcc- und bcc-BZ als besonders hilfreich. Ein einfacher Test der Zuordnungen ist, die Bandstruktur am $\bar{\Gamma}$ Punkt der 2DBZ mit den berechneten Bandstrukturen der zugeordneten Bulk Bänder zu vergleichen.

Weiter wird in den Rechnungen die Spin-Bahn-Wechselwirkung vernachlässigt. Allerdings ist die Spin-Bahn-Wechselwirkung in der Regel sehr klein, so dass die Ergebnisse von ihr nur leicht verändert werden würden. Somit sind die beiden Spinkanäle (Majoritäts- und Minoritätsspin) entkoppelt, und die Spinrichtung bleibt beim Überqueren der Grenzfläche erhalten. Da der Rashba-Effekt von der Spin-Bahn-Wechselwirkung hervorgerufen wird, ist dieser in den hier gezeigten Rechnungen nicht enthalten.

Im Folgenden ist, wenn nichts anderes angegeben wird, der Energienullpunkt der Energieskala auf das gemittelte Potential am Rand der ASA-Kugel (V_{MT}) im Fe Halbraum gesetzt. Damit lassen sich die Energieskalen in verschiedenen Diagrammen direkt miteinander vergleichen.

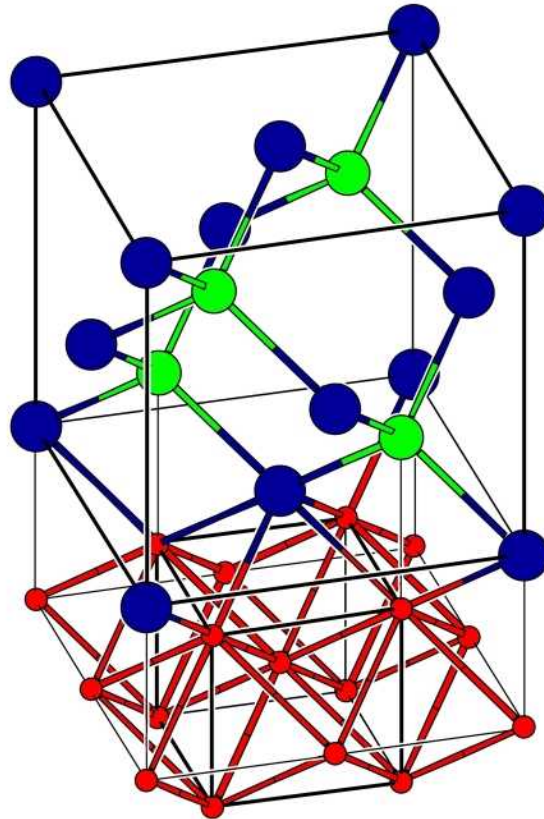


Abbildung 6.4: Gitterstruktur einer abrupten Zn terminierten Fe/ZnSe(001) Grenzfläche. Es sind 3 ML Fe (rote Kugeln) und 5 ML ZnSe (Zn blaue und Se grüne Kugeln) abgebildet. Die Bulk Einheitszellen von ZnSe und Fe sind durch dicke, schwarze Linien angedeutet.

6.2 Fe/Halbleiter(001)

In diesem Abschnitt wird die ballistische Spininjektion von Fe in ZnSe und GaAs in der (001) Orientierung untersucht. Eine solche Heterostruktur kann in hoher Qualität hergestellt werden. Es wird meistens eine dünne Fe Schicht epitaktisch auf GaAs(001) [121, 122] bzw. auf ZnSe(001) [123] abgeschieden. In dieser Orientierung besteht die auf die zweidimensionale Geometrie angepasste Einheitszelle im Fe aus zwei unterschiedlichen Fe Atomen und im HL aus zwei Monolagen (ML) mit je zwei Atomen: dem Anion und einer Leerstelle bzw. dem Kation und der zweiten Leerstelle. In Abbildung 6.4 ist eine (001) orientierte Grenzfläche, bestehend aus 3 ML Fe und 5 ML ZnSe, abgebildet. In dieser Orientierung gibt es zwei mögliche Terminierungen: eine Kation- und eine Anionterminierung. Um die Störungen durch die Grenzfläche selbstkonsistent zu beschreiben, werden die Potentiale von 4 ML (8 Atome) Fe und 2 ML (4 Atome) HL an der Grenzfläche elektronisch relaxiert. Alle anderen Fe und HL Monolagen weiter von der Grenzfläche entfernt werden mit Bulk Potentialen beschrieben, da die Störungen in den Potentialen im Gegensatz zu denen in

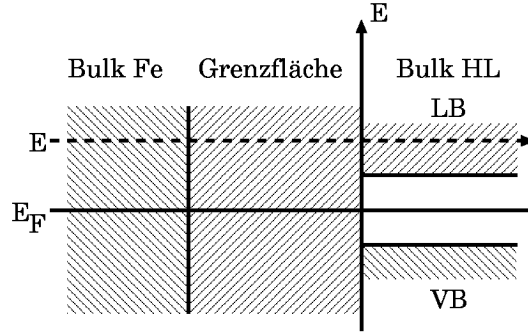


Abbildung 6.5: Lage der Bänder bei der heißen Spininjektion bei $k_{\parallel} = 0$. Die Energie E der injizierten Elektronen ist durch eine gestrichelte Linie dargestellt.

den Wellenfunktionen rasch abklingen.

6.2.1 Heiße Spininjektion

Um den Einfluss der Symmetrie der Wellenfunktionen zu studieren, wird zunächst die ballistische Spininjektion von Fe(001) in HL als Funktion der Energie untersucht. Dazu werden die Bulk HL Potentiale im Grundzustand, d.h. mit der Fermienergie in der Mitte der Bandlücke, fixiert und anschließend die Energie der injizierten Elektronen von der Fermienergie beginnend erhöht. Die Lage der HL Bänder ist in Abbildung 6.5 skizziert.

Der Einfachheit halber wird die heiße Spininjektion nur am $\bar{\Gamma}$ Punkt, d.h. bei $k_{\parallel} = 0$, untersucht. Korrekterweise müsste über die gesamte 2DBZ integriert werden, da auch Zustände im HL besetzt werden und zum Strom beitragen, die weiter vom $\bar{\Gamma}$ Punkt entfernt liegen. Die Beschränkung auf den $\bar{\Gamma}$ Punkt wird damit motiviert, dass in typischen Spinelektronik-Anwendungen nur die untersten Zustände im LB in der Größenordnung von einigen 10meV besetzt werden [113]. Da ZnSe und GaAs direkte HL sind, ist nur ein sehr kleiner Bereich um den $\bar{\Gamma}$ Punkt mit einer Ausdehnung von ungefähr einem Hundertstel der 2DBZ besetzt. In Abschnitt 6.2.1 wird gezeigt, dass es für diese Energien ausreicht, die Spinpolarisation nur am $\bar{\Gamma}$ Punkt zu betrachten. Dies hat den Vorteil, dass die Untersuchung der Symmetrie dort relativ einfach ist, da der $\bar{\Gamma}$ Punkt die volle Punktsymmetrie der entsprechenden Grenzflächennormalen, hier die [001] Richtung, im Kristall besitzt. Im Folgenden sind daher die Eigenschaften am $\bar{\Gamma}$ Punkt vom besonderen Interesse.

Brillouinzonen und Bandstrukturen

Als erstes wird die 2DBZ von Fe diskutiert, die in Abbildung 6.6 links zusammen mit der Bulk Brillouinzone (BZ) dargestellt ist. Die hier gezeigte 2DBZ unterscheidet sich von der 2DBZ einer freien Fe(001) Oberfläche. Sie ist um die Hälfte kleiner, weil hier zwei Fe Atome pro zweidimensionale Einheitszelle vorhanden sind. Die Richtung vom $\bar{\Gamma}$ Punkt in k_z Richtung entspricht in der Bulk BZ der Hochsymmetrierichtung Γ -H, d.h.

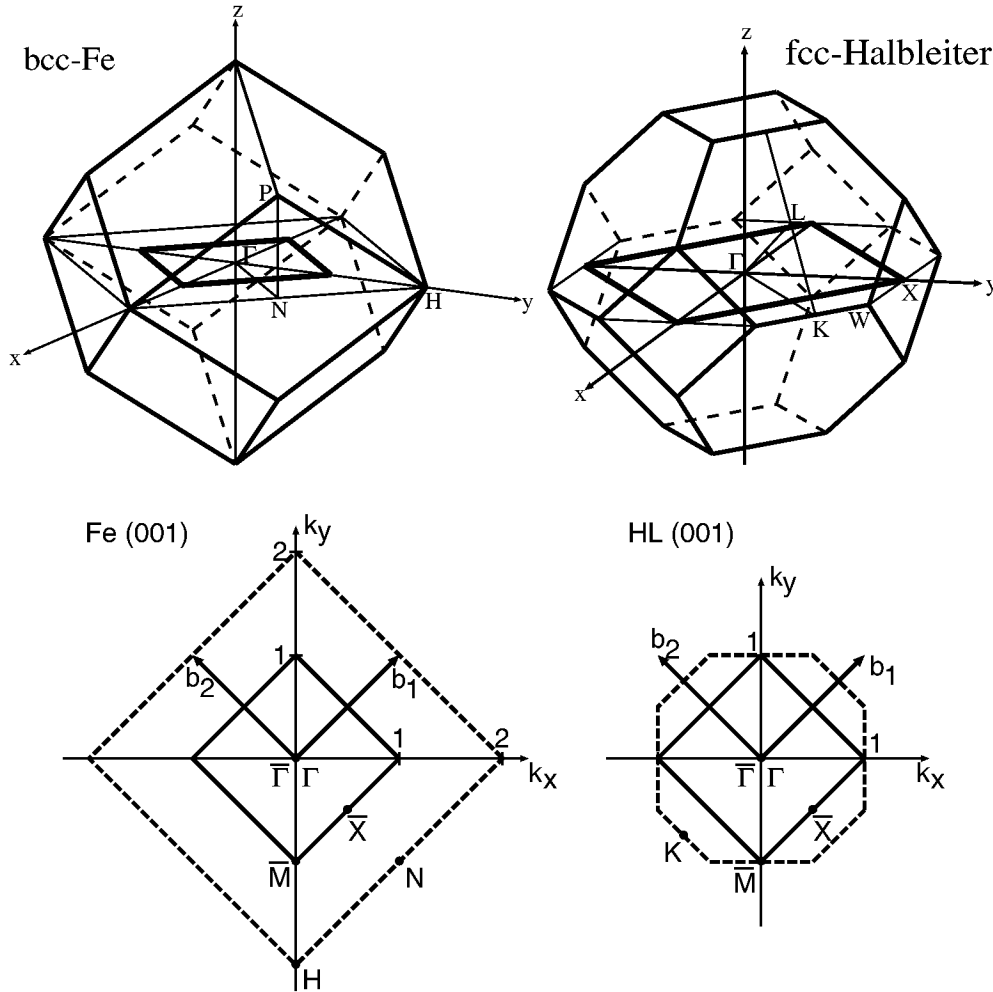


Abbildung 6.6: Oben: Bulk Brillouin-zonen (BZ) von bcc-Fe und fcc-HL. Dick eingezeichnet sind die zweidimensionalen BZ. Unten: Zweidimensionale BZ in der hier betrachteten Geometrie für Fe(001) und HL(001). In [001] Richtung haben die zweidimensionalen BZ eine Ausdehnung von $k_z = (-2 \dots 2) 2\pi/d_{\text{HL}}$ für Fe(001) und von $k_z = (-1 \dots 1) 2\pi/d_{\text{HL}}$ für HL(001). Die reziproken Vektoren sind in Einheiten von $2\pi/d_{\text{HL}}$ angegeben. Gestrichelte Linien stellen einen (001) Schnitt durch die jeweilige Bulk BZ dar. Da die zweidimensionale Einheitszelle von Fe(001) hier zwei Fe Atome enthält, ist die zweidimensionale BZ halb so groß wie bei einer einatomigen Einheitszelle.

der Δ Richtung. Diese [001] Hochsymmetrierichtung besitzt eine C_{4v} Symmetrie, d.h. eine vierfache Rotationssymmetrie und zwei Spiegelebenen parallel zur Rotationsachse (siehe Abbildung 6.4).

Wird die Bandstruktur am $\bar{\Gamma}$ Punkt ($\mathbf{k}_{\parallel} = 0$) der zweidimensionalen Einheitszelle berechnet, so werden dieselben Fe Bänder wie in der Bulk BZ entlang der Δ Richtung gefunden. Allerdings befindet sich am $\bar{\Gamma}$ Punkt noch ein zurückgefaltetes Band. Die Zurückfal-

tung wird durch die Verkleinerung der 2DBZ (in Bezug auf die 2DBZ einer freien Fe(001) Oberfläche) verursacht. Durch Anwendung des reziproken Gittervektors \mathbf{b}_1 und \mathbf{b}_2 (siehe Abbildung 6.6) wird zusammen ein Band zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet, das dem Band in der Bulk BZ entlang der Richtung N-P-N, d.h. der D Richtung, entspricht. Physikalisch bewirkt die Rückfaltung einen Phasenunterschied der Blochwellen an den Positionen der beiden Fe Atomen in der zweidimensionalen Einheitszelle. Ihre Position unterscheidet sich um einen Ortsvektor von $\mathbf{R} = (0, \frac{1}{2}, 0)d_{\text{HL}}$. Damit ergibt sich ein Phasenunterschied zwischen ihnen von

$$e^{i\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{R}} = e^{i\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{R}} = e^{i\pi} = -1.$$

Werden beide reziproken Gittervektoren ($\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$) angewendet, so wird wieder der Γ Punkt der Bulk BZ erreicht (siehe Abbildung 6.6). Dabei muss beachtet werden, dass der Gittervektor \mathbf{b}_1 eine k_z -Komponente von $-2 \times 2\pi/d_{\text{HL}}$ besitzt. Die Gleichheit dieses Bandes mit dem nicht zurückgefaltenen Band am $\bar{\Gamma}$ Punkt kann auch anhand des Phasenunterschieds zwischen den beiden Fe Atompositionen in der zweidimensionalen Einheitszelle gesehen werden

$$e^{i(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{R}} = e^{i2\pi} = 1.$$

Der Phasenunterschied ist derselbe wie bei dem nicht zurückgefalteten Band am $\bar{\Gamma}$ Punkt, und somit sind beide Bänder identisch. Daher stellt dieses Band keinen Stromkanal für den ballistischen Stromtransport dar und wird im Folgenden nicht berücksichtigt. Die Identifizierung solcher Bänder ist wichtig, da ansonsten beliebig viele Bänder durch mehrmalige Anwendungen der reziproken Gittervektoren zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet werden könnten, die aber keine zusätzlichen Stromkanäle darstellen.

In Abbildung 6.7 wird die Fe Bandstruktur am $\bar{\Gamma}$ Punkt in k_z Richtung für Majoritäts- und Minoritätselektronen gezeigt. Es ist das nicht zurückgefaltete Band (schwarz) entlang der Δ - sowie das zurückgefaltete Band (grau) entlang der D-Hochsymmetrielinie dargestellt. Die Zahlen geben die Symmetrie der Bänder entsprechend der Hochsymmetrielinie in der Bulk BZ an. Die Symmetrien der Bänder werden weiter unten zusammen mit denen vom HL diskutiert.

In Abbildung 6.6 rechts ist die 2DBZ des HL zu sehen. Im HL Halbraum werden keine weiteren Bänder zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet. Es ist nur ein Band vorhanden, das dem Band in der Bulk BZ entlang der Richtung Γ -X, d.h. der Δ Richtung entspricht. Die [001] Richtung hat im HL eine geringere Symmetrie als im Fe, nämlich eine C_{2v} Symmetrie (siehe Abbildung 6.4), weshalb auch die Fe/HL(001) Grenzfläche diese reduzierte Symmetrie besitzt. Diese Tatsache ist wichtig, da hierdurch weitere Fe Bänder an der Grenzfläche an das LB koppeln können, die bei einer C_{4v} Symmetrie orthogonal zum Δ_1 LB wären. Die Bandstrukturen für ZnSe(001) und GaAs(001) sind in Abbildung 6.8 dargestellt. Wichtig für die ballistische Spininjektion ist, dass die untersten LB in ZnSe(001) und GaAs(001) eine Δ_1 Symmetrie aufweisen.

Für die Spininjektion muss nun herausgefunden werden, welche Fe Bänder an das LB im HL koppeln können. Im Folgenden werden daher die Symmetrien der Fe und der HL Zustände diskutiert. In Tabelle 6.1 sind die Symmetrien der Bulk Fe Bänder entlang der Δ

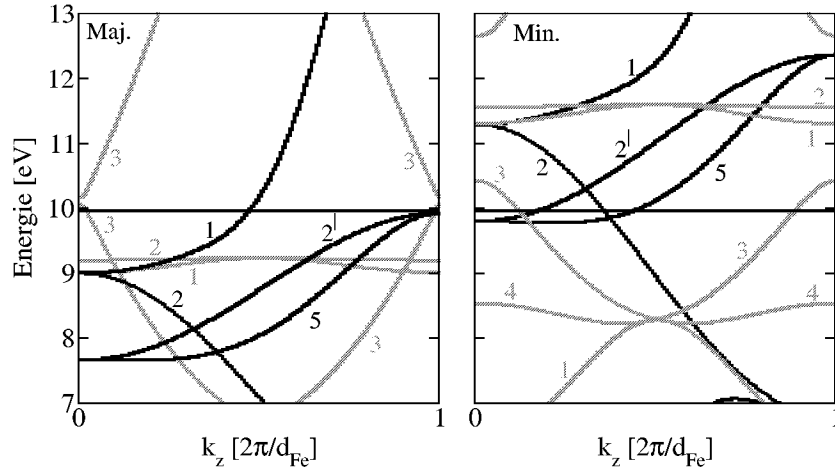


Abbildung 6.7: Bandstruktur von Fe(001) am $\bar{\Gamma}$ Punkt in k_z Richtung für Majoritäts- (links) und Minoritätselektronen (rechts). Schwarze Linien zeigen die Bänder entlang Γ -H (Δ Richtung) und grau entlang N-P-N (D Richtung). Die Fermienergie ist durch eine horizontale Linie angedeutet. Die Zahlen geben die entsprechenden Symmetrien der Bänder in der Bulk Brillouinzone an [124], d.h. eine schwarze 2 bezeichnet eine Δ_2 und eine graue 3 eine D_3 Symmetrie.

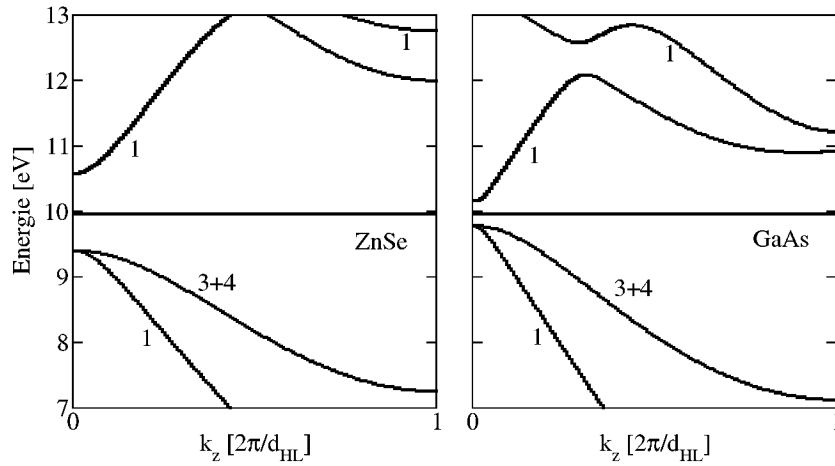


Abbildung 6.8: Bandstruktur von ZnSe(001) (links) und GaAs(001) (rechts) am $\bar{\Gamma}$ Punkt in Richtung von k_z . Die Zahlen geben die Δ Symmetrie der Bänder in der Bulk Brillouinzone an [125]. Die Fermienergie ist in der Mitte der Bandlücke angenommen worden.

und der D-Richtung mit Kugelflächenfunktionen (Orbitale) als Basisfunktionen aufgelistet.

Bei der Symmetriediskussion muss berücksichtigt werden, dass die Symmetrienomenklatur im Bulk Fe sich auf die C_{4v} und im Bulk HL auf die C_{2v} Symmetrie bezieht. Daher

Symmetrie	Darstellung	Kompatibilität
Δ_1	s, p_z, d_{z^2}	Ja
Δ_2	$d_{x^2-y^2}$	Nein
$\Delta_{2'}$	d_{xy}	Ja
Δ_5	p_x, d_{xz} und p_y, d_{yz}	Nein
D_1	$s, p_x, d_{yz}, d_{x^2-y^2} - d_{z^2}$	Ja
D_2	$d_{x^2-y^2} + d_{z^2}$	Ja
D_3	$p_y + p_z, d_{zx}$	Ja

Tabelle 6.1: Symmetrien entlang der Δ und der D-Richtung in Bulk Fe dargestellt als Kugelflächenfunktionen (Orbitale) [126]. In der rechten Spalte ist die Kompatibilität der Fe Zustände mit der Δ_1 Darstellung der C_{2v} Symmetrie des Halbleiters aufgeführt. Die x, y und z Achsen beziehen sich auf die kubischen Richtungen im bcc-Fe.

kann nicht nur das Fe Δ_1 Band, das wie das LB rotationssymmetrisch um die [001] Richtung und aus s, p_z und d_{z^2} Orbitalen aufgebaut ist, an das Δ_1 LB ankoppeln, sondern auch das Fe $\Delta_{2'}$ Band, das lokal aus d_{xy} Orbitalen besteht. Die x, y und z Achsen beziehen sich auf die kubischen Richtungen im bcc-Fe. Somit zeigen die Fe Δ_1 Zustände in Richtung der HL Atome (z Richtung) und enthalten ausgedehnte s und p_z Orbitale, wohingegen die Fe $\Delta_{2'}$ Zustände aus stärker lokalisierten und in der xy Ebene liegenden d_{xy} Orbitalen aufgebaut sind. Daher lässt sich vermuten, dass die Fe Δ_1 Blochwellen besser an das LB ankoppeln und somit diese Elektronen die Grenzfläche besser überqueren können als die Fe $\Delta_{2'}$ Elektronen. Die Fe Δ_2 Bänder, die lokal eine $d_{x^2-y^2}$ Symmetrie besitzen, und die Fe Δ_5 Bänder, die lokal aus p_x und d_{xz} oder p_y und d_{yz} Orbitalen bestehen, können aus Symmetriegründen nicht an das LB ankoppeln, da sie nicht kompatibel zum Δ_1 LB in der C_{2v} Symmetrie sind.

Für die Δ Richtung soll die obige Symmetriediskussion und die Kompatibilität der verschiedenen Fe Bänder veranschaulicht werden. In Abbildung 6.9 sind die Orbitale bzw. die Symmetrien der Fe Zustände schematisch dargestellt. Abgebildet ist eine Zn terminierte Grenzfläche von Fe/ZnSe(001), genauer die Grenzflächenmonolagen im Fe und im ZnSe sowie die erste Se ML. An den Zn Atomen ist das s und p_z -förmige LB von ZnSe angedeutet, das die volle Rotationssymmetrie um die [001] Richtung besitzt. An den Fe Atomen sind die vier unterschiedlichen Fe Bänder skizziert (für das Δ_5 Band nur eine der beiden entarteten Richtungen). Die Schraffierung symbolisiert das Vorzeichen des Orbitals. Anhand der Skizzen können die oben diskutierten Kopplungen der Fe Bänder mit dem s -artigen LB anschaulich verstanden werden. Wird das Überlappintegral des Fe mit dem HL Orbital betrachtet, so ergibt dies bei den Fe Δ_1 und $\Delta_{2'}$ Orbitalen einen nichtverschwindenden Wert, d.h. diese Fe Zustände können aus Symmetriegründen an das LB des HL koppeln. Dagegen verschwindet das Überlappintegral der Fe Δ_2 und Δ_5 Orbitale mit dem Orbital des LB. Daher können die Δ_2 und Δ_5 Bänder aus Symmetriegründen nicht an das LB des HL koppeln.

Zusätzlich zu den Fe Zuständen mit Δ Symmetrie gibt es noch zurückgefaltete Zustände

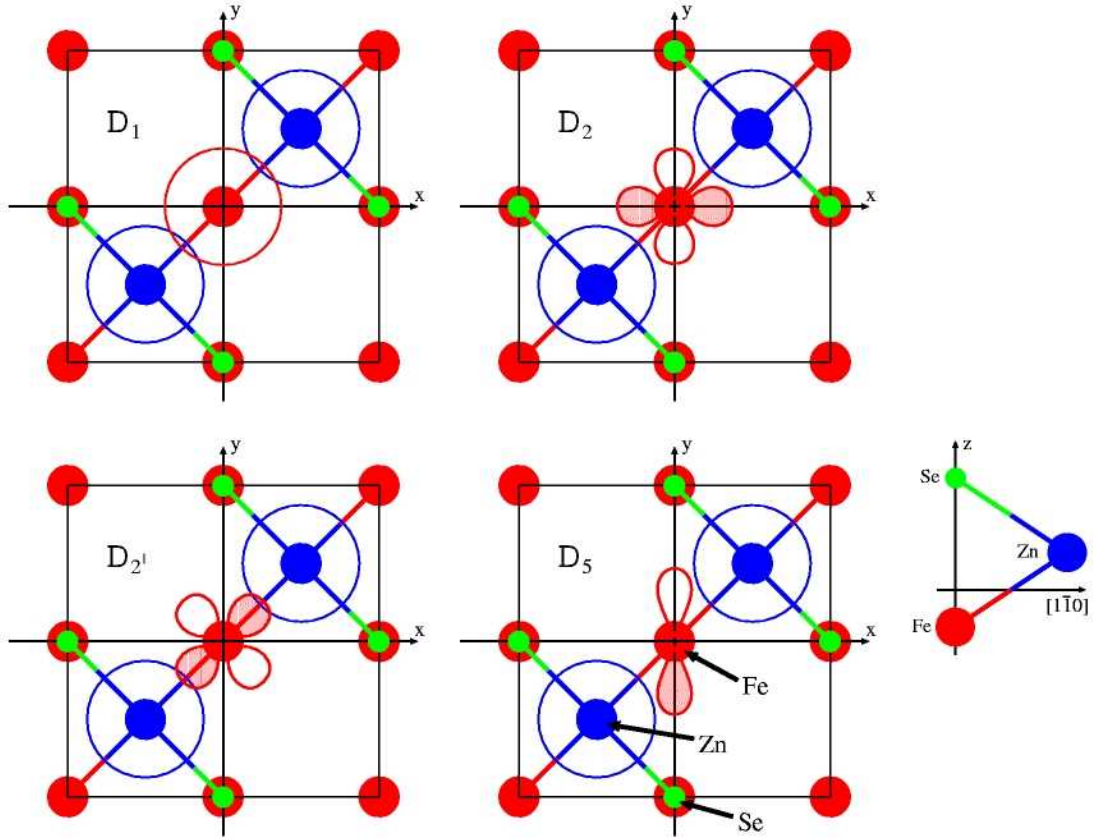


Abbildung 6.9: Symmetrien der verschiedenen Fe Bänder (Δ_1 (oben links), Δ_2 (oben rechts), Δ'_2 (unten links) und Δ_5 (unten rechts)) und des LB dargestellt durch Kugelflächenfunktionen. Es ist eine abrupte Zn terminierte Fe/ZnSe(001) Grenzfläche abgebildet. Rote Kreise stellen Fe, blaue Zn und grüne Se Atome dar (siehe Abbildung 6.4). Die z Achse zeigt aus der Zeichenebene heraus. Die Schraffierungen symbolisieren unterschiedliche Vorzeichen der Orbitale.

entlang der D Richtung (siehe Tabelle 6.1). An der Fermienergie gibt es für beide Spinrichtungen ein Band mit D_3 Symmetrie. Ein D_1 und D_2 Band ist dagegen nur für Minoritätselektronen 1.3eV oberhalb der Fermienergie vorhanden, da sie im Majoritätsband aufgrund der Austauschwechselwirkung energetisch unterhalb der Fermienergie liegen. Da beide Bänder in der Bandstruktur einen sehr flachen Verlauf zeigen, sind sie stark lokalisiert. Daher haben sie nur einen geringen Überlapp mit den HL Zuständen an der Grenzfläche. Wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird, ist der Einfluss der D-Bänder auf den Leitwert sehr klein, weil es sich um zurückgefaltene Bänder mit einer stärkeren Oszillation der Wellenfunktion in der Grenzflächenebene als bei den Δ Zuständen handelt. Diese können eine Grenzfläche oder eine Tunnelbarriere [83] schlechter überqueren. Im Folgenden wird sich die Diskussion daher auf die Δ Bänder konzentrieren.

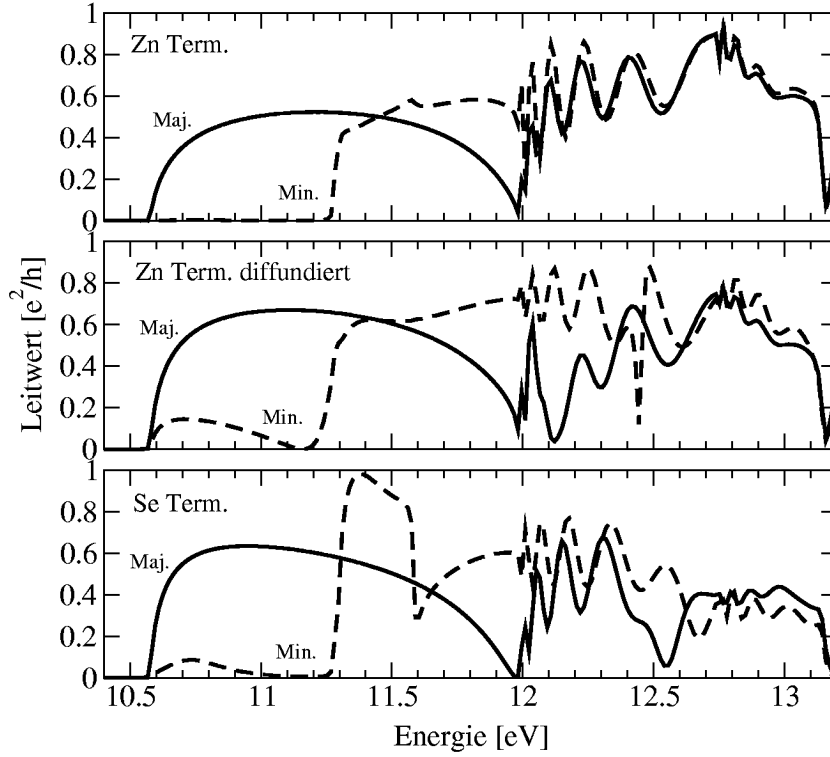


Abbildung 6.10: Heiße Spininjektion am $\bar{\Gamma}$ Punkt von Fe in ZnSe(001) mit einer abrupten Zn (oben), einer diffundierten Zn (Mitte) und einer Se terminierten Grenzfläche. Ausgezogene Linien zeigen den Leitwert der Majoritäts- und gestrichelte den der Minoritätselektronen.

Leitwert

Für eine symmetriebedingte hohe Spininjektion ist es wichtig, dass Bänder im Fe für Majoritäts- und Minoritätselektronen mit unterschiedlichen Symmetrien an der Fermienergie zur Verfügung stehen, die an das LB ankoppeln können: Im Majoritätsband gibt es ein Δ_1 Band⁵ und im Minoritätsband nur ein $\Delta_{2'}$ Band. Im Minoritätsband liegt die Fermienergie in der sogenannte s - d Hybridisierungslücke (Δ_1 Lücke), welche durch die Wechselwirkung der s und d_{z^2} Orbitalen hervorgerufen wird. Das Δ_1 Band ist dort erst 1.3eV oberhalb der Fermienergie vorhanden. Es wird eine symmetriebedingte hohe Spinpolarisation erwartet, falls die Fe Δ_1 und $\Delta_{2'}$ Bänder unterschiedlich gut an das LB ankoppeln. Dieses lässt sich an dem berechneten Leitwert erkennen, der für Fe/ZnSe(001) in Abbildung 6.10 und für Fe/GaAs(001) in Abbildung 6.11 dargestellt ist. Das obere Bild zeigt die Zn- bzw. Ga terminierte und das untere die Se- bzw. As terminierte Grenzfläche. Das mittlere Bild wird im nächsten Abschnitt diskutiert. Der Leitwert steigt steil an, sobald die Energie der

⁵Genaue Bandstrukturechnungen [124] finden an der Fermienergie im Majoritätsband auch das $\Delta_{2'}$ und das Δ_5 Band. Da diese Bänder nicht bzw. nur sehr schwach im Vergleich zum Δ_1 Band an den HL koppeln können, ändern sich hierdurch die Ergebnisse nicht.

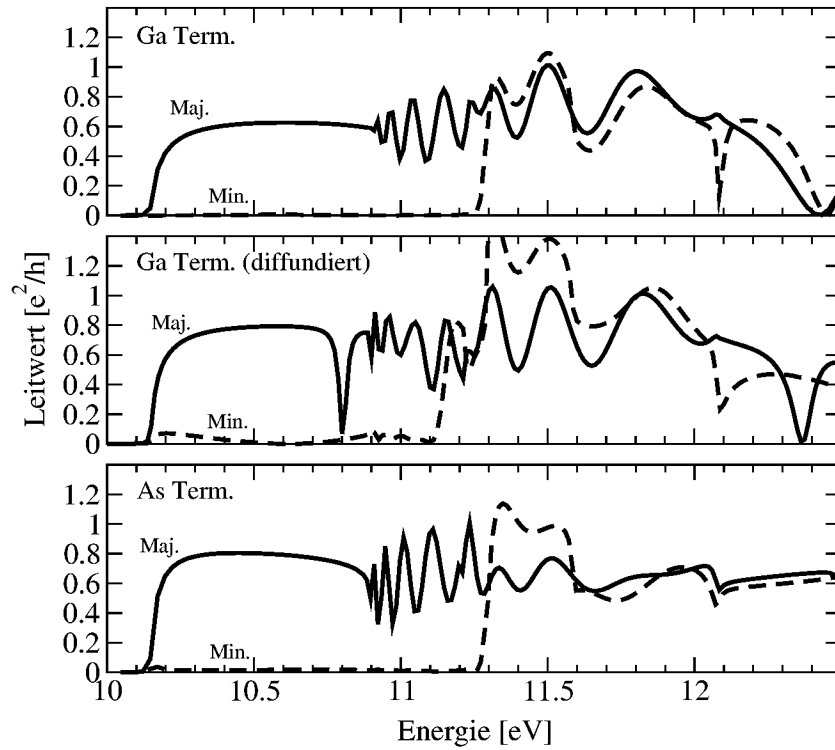


Abbildung 6.11: Heiße Spininjektion am $\bar{\Gamma}$ Punkt von Fe in GaAs(001) mit einer abrupten Ga (oben), einer diffundierten Ga (Mitte) und einer As terminierten Grenzfläche. Ausgezogene Linien zeigen den Leitwert der Majoritäts- und gestrichelte den der Minoritätselektronen.

injizierten Elektronen oberhalb des Leitungsbandminimums (LBM) ist. In der Bandlücke fallen die Zustände im HL Halbraum exponentiell von der Grenzfläche weg ab. Der Leitwert für Majoritätselektronen steigt auf Werte zwischen 0.5 und 0.8 in Einheiten von e^2/h an. Im Minoritätsband dagegen ist er um Größenordnungen kleiner. Aus diesen Ergebnissen folgt, dass das Fe Δ_1 Band besser an das LB ankoppeln kann als das Fe $\Delta_{2'}$ Band. Im Gegensatz zum $\Delta_{2'}$ Band, das aus lokalisierten d Orbitalen in der xy Ebene aufgebaut ist, enthält das Δ_1 Band ausgedehnte s und p_z Orbitale, die in die Richtung des HL zeigen. In dem Energiebereich oberhalb des LBM beträgt die Spinpolarisation nach Gleichung (6.5) für die Se terminierte Grenzfläche mehr als 75% und für die übrigen Terminierungen sogar mehr als 97%. Würde ein HL mit ebenfalls C_{4v} Symmetrie benutzt, z.B. MgO(001), wäre das Fe $\Delta_{2'}$ Band orthogonal zu dem Δ_1 LB, und die Spinpolarisation am $\bar{\Gamma}$ Punkt würde 100% betragen.

Drastische Änderungen ergeben sich für Energien 1.3eV oberhalb der Fermienergie. Ab dort steht auch im Minoritätsband ein Δ_1 Band zum Ladungstransport zur Verfügung. Der Leitwert nimmt im Minoritätsband stark zu und übersteigt sogar die des Majoritätsbandes, wodurch die Spinpolarisation am $\bar{\Gamma}$ Punkt negativ wird (Injektion hauptsächlich von

Minoritätselektronen). In diesem Energiebereich kann der Leitwert in der Fe/ZnSe(001) Heterostruktur maximal $1e^2/h$ betragen, da nur ein LB und somit am $\bar{\Gamma}$ Punkt nur ein Stromkanal im HL Halbraum zur Verfügung steht. Dagegen gibt es in GaAs drei LB, so dass der maximale Leitwert $3e^2/h$ beträgt (siehe Bandstruktur in Abbildung 6.8).

Damit ist gezeigt worden, dass die hohe Spinpolarisation für niedrigere Energien durch das Fehlen des Δ_1 Bandes für die Minoritätselektronen hervorgerufen wird. Weiter wird deutlich, dass die zurückgefallenen D-Bänder einen vernachlässigbaren Einfluss auf den Leitwert ausüben. Diese Ergebnisse belegen, dass bei der ballistischen Spininjektion die Symmetrie der Wellenfunktionen sehr wichtig ist und, wie in diesem Fall, eine hohe Spinpolarisation hervorrufen kann. Dies wird daher in dieser Arbeit auch symmetriebedingte hohe Spinpolarisation genannt.

Anhand der Abbildungen 6.10 und 6.11 lässt sich weiter erkennen, dass bei Energien, an denen sich ein Bandmaximum oder Minimum im Bulk Fe oder HL befindet, der Leitwert ein lokales Minimum besitzt (z.B. in Fe/ZnSe(001) mit einer Se terminierten Grenzfläche bei 11.6eV im Minoritätsband) oder sogar auf Null abfällt (z.B. in Fe/ZnSe(001) bei 12.0eV im Majoritätsband). Dieses lässt sich qualitativ dadurch erklären, dass die Gruppengeschwindigkeit bei einem Bandextremum gegen Null geht und so kein Ladungstransport in dem entsprechenden Halbraum erfolgen kann (siehe auch Kapitel 6.2.2). Falls noch andere Bänder am Transport teilnehmen, kann dieser Effekt teilweise durch Intensitätsänderungen in einem anderen Band überschattet werden (z.B. in Fe/ZnSe(001) bei 12.0eV im Minoritätsband).

Leitwertoszillationen

Bei der heißen Spininjektion in Fe/ZnSe(001) (Abbildung 6.10) können bei Energien oberhalb von 12.0eV und in Fe/GaAs(001) (Abbildung 6.11) oberhalb von 10.9eV starke Oszillationen des Leitwerts beobachtet werden. In diesem Energiebereich nehmen im HL mehrere LB am Stromtransport teil (siehe Bandstruktur in Abbildung 6.8). Die Oszillationen lassen sich qualitativ durch eine teilweise konstruktive und destruktive Überlagerung der Wellenfunktionen der verschiedenen LB erklären. Normalerweise sind Zustände derselben Energie aber mit unterschiedlichen \mathbf{k} Vektoren in einem unendlichen Kristall orthogonal zueinander und eine Interferenz ist nicht möglich. Lokal, d.h. für die Stromdichte $j(\mathbf{r})$ am Ort \mathbf{r} , ist diese Orthogonalität jedoch nicht gegeben, auch nicht, wenn über die Einheitszelle gemittelt wird. Die Oszillationen lassen sich besser erkennen, wenn der Leitwert in Abhängigkeit des Abstandes der Ebene von der Grenzfläche dargestellt wird, durch die der Leitwert im HL berechnet wird. Dieses wird in Abbildung 6.12 für eine Zn terminierte Grenzfläche in Fe/ZnSe(001) bei einer Energie von 12.2eV für die Majoritätselektronen am $\bar{\Gamma}$ Punkt gezeigt. Dabei wurde, wie in allen anderen Berechnungen, über eine HL "Einheitszelle", bestehend aus einer Zn ML und einer Se ML, gemittelt. Die z Achse bezeichnet die Position der Ebene im HL, durch die der Leitwert berechnet wird. Als Nullpunkt wird die Fe/HL Grenzfläche gewählt. Für diese Energie sind Leitwerte von über $1e^2/h$ erlaubt, da mehrere Bänder im HL zum Stromtransport beitragen.

Die Oszillationen lassen sich mit einem sehr einfachen Modell beschreiben, bei dem zwei

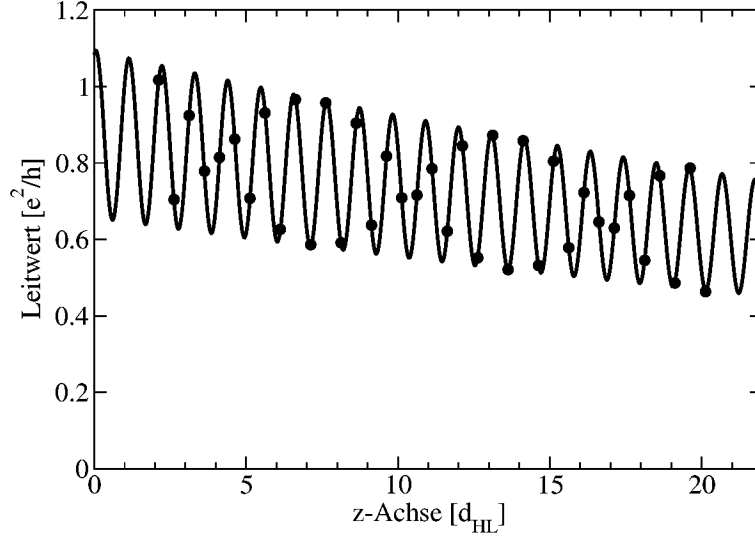


Abbildung 6.12: Leitwertoszillationen am $\bar{\Gamma}$ Punkt bei der heißen Injektion in Fe/ZnSe(001) mit einer abrupten Zn terminierten Grenzfläche bei einer Energie von 12.2eV für Majoritätselektronen. Die Punkte stellen die berechneten Werte und die Linie eine Anpassung an die Punkte dar (siehe Text).

ebene Wellen derselben Energie aber unterschiedlichen k_z Wellenvektoren angenommen werden, die im HL von der Grenzfläche bei $z = 0$ in positiver z Richtung laufen

$$\psi(z) = a_1 e^{-ik_1 z} + a_2 e^{-ik_2 z}. \quad (6.6)$$

Um Oszillationen zu erhalten, wird die Fe/HL Grenzfläche benötigt, um die Phasenbeziehung zwischen den beiden Wellen festzulegen. Diese wird durch unterschiedliche Kopplungen der beiden Zustände an der Grenzfläche hervorgerufen. Für den einfachen Fall, dass beide Wellenfunktionen dieselbe Amplitude ($a_1 = a_2$) besitzen, ergibt sich eine Wahrscheinlichkeitsstromdichte (in atomaren Einheiten)

$$j(z) = -i \left(\psi^*(z) \nabla_z \psi(z) - \psi(z) \nabla_z \psi^*(z) \right) \quad (6.7)$$

normiert auf die einfallende Stromdichte in Abhängigkeit von z

$$j(z) = \frac{j^{\text{aus}}(z)}{j^{\text{ein}}} = 1 + \cos(\Delta k_z z), \quad (6.8)$$

mit $\Delta k_z = k_1 - k_2$. Die Gleichung besagt, dass im Ortsmittel aufgrund der Normierung die Stromdichte 1 beträgt, diese aber wegen der Interferenz zwischen $0 \dots 2$ oszilliert. Somit beschreibt bereits dieses sehr einfache Modell qualitativ die Oszillationen. Da die Amplituden der beiden LB im ZnSe aufgrund unterschiedlicher Kopplungsstärken an den Fe Halbraum verschieden groß sind, ist die Amplitude der Oszillationen verkleinert.

	G_0 (e^2/h)	G_1 (e^2/h)	Δk_z ($2\pi/d_{\text{HL}}$)	φ (π)	κ ($1/d_{\text{HL}}$)	K
\uparrow	0.88	0.22	0.921	-0.11	1.7×10^{-2}	0.99991
\downarrow	0.91	0.30	0.921	-0.26	1.6×10^{-2}	0.99996

Tabelle 6.2: Ermittelte Parameter aus dem *Least Square Fit* der Funktion (6.9) an die Leitwertoszillationen am $\bar{\Gamma}$ Punkt für Majoritäts- (erste Zeile) und Minoritätselektronen (zweite Zeile) in einer abrupten Zn terminierten Fe/ZnSe(001) Struktur bei 12.2eV. K gibt den Korrelationskoeffizienten der Anpassung an.

In Abbildung 6.12 sind die berechneten Werte (Punkte) mit einem *Least Square Fit*⁶ an folgende Formel angepasst worden (Linie)

$$G(z) = \left[G_0 + G_1 \cos(\Delta k_z z - \varphi) \right] e^{-\kappa z}. \quad (6.9)$$

Dabei wurde ein leichtes, exponentielles Abklingen des Leitwertes mit größer werdenden Abstand von der Grenzfläche erlaubt, was von dem kleinen, aber nicht verschwindenden Imaginärteil der Energie hervorgerufen wird (siehe Anhang B). Die sich so ergebenden Parameter sind in der Tabelle 6.2 für die Majoritäts- und Minoritätselektronen (in Abbildung 6.12 nicht gezeigt) aufgelistet. Die aus der Anpassung ermittelten Werte für die Oszillationswellenlänge Δk_z für beide Spinrichtungen stimmen gut mit dem Wert überein, der aus der Bandstruktur für ZnSe(001) (siehe Abbildung 6.8) bei 12.2eV ausgelesen wird: $\Delta k_z = 0.91 \times 2\pi/d_{\text{HL}}$. Dabei muss beachtet werden, dass für beide Wellenfunktionen die Gruppengeschwindigkeiten bzw. die Ableitungen dE/dk_z dasselbe Vorzeichen haben.

Experimentell wird es sehr schwierig sein, die Oszillationen aus folgenden Gründen nachzuweisen: Die obigen Berechnungen erfolgen am $\bar{\Gamma}$ Punkt und eine Integration über die 2DBZ wird die Oszillationen stark verringern. Wird eine Spannungsmessung für verschiedene Abstände von der Grenzfläche mit einer zweiten Elektrode durchgeführt, so wird das gesamte System beeinflusst, da Quantentrogzustände erzeugt werden können. Deshalb darf die Spannungsmessung nur wenig mit dem System wechselwirken, z.B. über ein Raster-Tunnel-Mikroskop. Daraus ergibt sich sogar eine gewisse $\bar{\Gamma}$ Filterung (siehe Abschnitt 6.2.3). Allerdings liegen die Oszillationen in derselben Größenordnung wie die Atomabstände, so dass eine Unterscheidung schwierig ist. Dieses Phänomen ist in dem ursprünglichen Landauer-Büttiker Formalismus nicht enthalten, da dort das Streuzentrum über ideale Leiter (freies Elektronenverhalten) mit dem Elektronenreservoir verbunden ist, wo die Phase der Wellenpakete und somit die hier gefundene Interferenz verlorengeht. In den Berechnungen hier gibt es aber keine idealen Elektroden, sondern Zuleitungen mit einer komplizierten Bandstruktur, wie z.B. in diesem Fall zwei LB derselben Symmetrie an der gleichen Energie. Weiter ist kein Reservoir vorhanden, sondern unendliche Halbräume, wobei der Leitwert durch eine Ebene mit einem endlichen Abstand von der Grenzfläche berechnet wird. Physikalisch gesehen geht die Phaseninformation bzw. die Interferenz der

⁶Erstellt mit dem Programm: Grace Version 5.1.1

beiden Blochwellen verloren, wenn sie verschiedenen, elastischen oder inelastischen Streuprozessen unterworfen sind, wobei die Unterschiede durch die unterschiedlichen Wellenfunktionen hervorgerufen werden. Damit verschwinden die Oszillationen für Abstände von der Grenzfläche, die wesentlich größer als die mittlere freie Weglänge sind. Dies entspricht der Situation in einem Elektronenreservoir.

Diffundierte Grenzfläche

Bei dem Wachstum von Fe auf GaAs(001) wurde festgestellt [121], dass die Grenzfläche sehr reaktiv ist und eine starke Grenzflächendiffusion stattfindet. Um dies zu verhindern, wird die Fe Schicht bei relativ niedrigen Temperaturen (etwa 50°C) mittels Molekularstrahlepitaxie⁷ abgeschieden. Dabei ergeben sich glattere und defektfreiere Fe Schichten auf einer As terminierten GaAs(001) Oberfläche als auf einer Ga terminierten. Eine *ab initio* Studie [127] der Grenzfläche von Fe/GaAs(001) hat ergeben, dass Fe und As Atome eine starke Bindung eingehen und sogar Ga Atome aus der Oberfläche verdrängen können. Damit lässt sich erklären, dass für eine As terminierte Oberfläche die abrupte Grenzfläche energetisch bevorzugt wird. Währenddessen ist es auf einer Ga terminierten Oberfläche günstiger [127], dass ein Fe Atom pro zweidimensionale Einheitszelle auf die Leerstellenposition in der erste Ga ML an der Grenzfläche hineindiffundiert. Im folgenden wird die Spininjektion durch diese diffundierte Grenzfläche untersucht. Die hierbei auftretenden, großen Atomverschiebungen [127] werden in diesen Rechnungen nicht berücksichtigt. Obwohl keine vergleichbaren Rechnungen für Fe/ZnSe(001) bekannt sind und auch die ZnSe(001) Oberfläche weniger reaktiv ist als die GaAs(001) Oberfläche, wird zum Vergleich auch die analoge, diffundierte Zn Terminierung diskutiert. Die Potentiale der diffundierten Grenzfläche werden aus einer selbstkonsistent berechneten Fe/GaAs/Fe bzw. Fe/ZnSe/Fe Heterostruktur herausgeschnitten.

Die berechneten Leitwerte für die heiße Spininjektion am $\bar{\Gamma}$ Punkt sind in den Abbildungen 6.10 für Fe/ZnSe(001) und in 6.11 für Fe/GaAs(001) jeweils im mittleren Bild dargestellt. Für beide diffundierten Terminierungen ergeben sich ähnliche Verläufe wie für die abrupte Grenzfläche. Dies ist verständlich, da die Grenzfläche auch bei einem diffundierten Fe Atom noch die volle C_{2v} Symmetrie und die perfekte zweidimensionale Translations-symmetrie besitzt. Somit haben alle obigen Symmetrieüberlegungen Gültigkeit, und die \mathbf{k}_{\parallel} Erhaltung ist ebenfalls gegeben. Am diffundierten Fe Atom treten Resonanzen auf, die zu einem schmalen Leitwertmaximum oder -minimum führen. Bei Fe/ZnSe(001) liegen sie bei 12.0eV für Majoritäts- und bei 12.5eV für Minoritätselektronen und bei Fe/GaAs(001) bei 10.8eV bzw. 11.2eV. Diese lassen sich ebenfalls in einer atom aufgelösten Zustandsdichte beobachten.

Im Gegensatz dazu würde eine Grenzflächenrauhigkeit die Symmetrie der Grenzfläche reduzieren und dadurch könnten noch andere Fe Bänder, die ansonsten aus Symmetriegründen nicht an das LB ankoppeln können, am Ladungstransport teilnehmen. Weiter wird durch die Rauigkeit die Translationssymmetrie gebrochen, und die \mathbf{k}_{\parallel} Erhaltung ist nicht

⁷Englisch: *Molecular Beam Epitaxy*

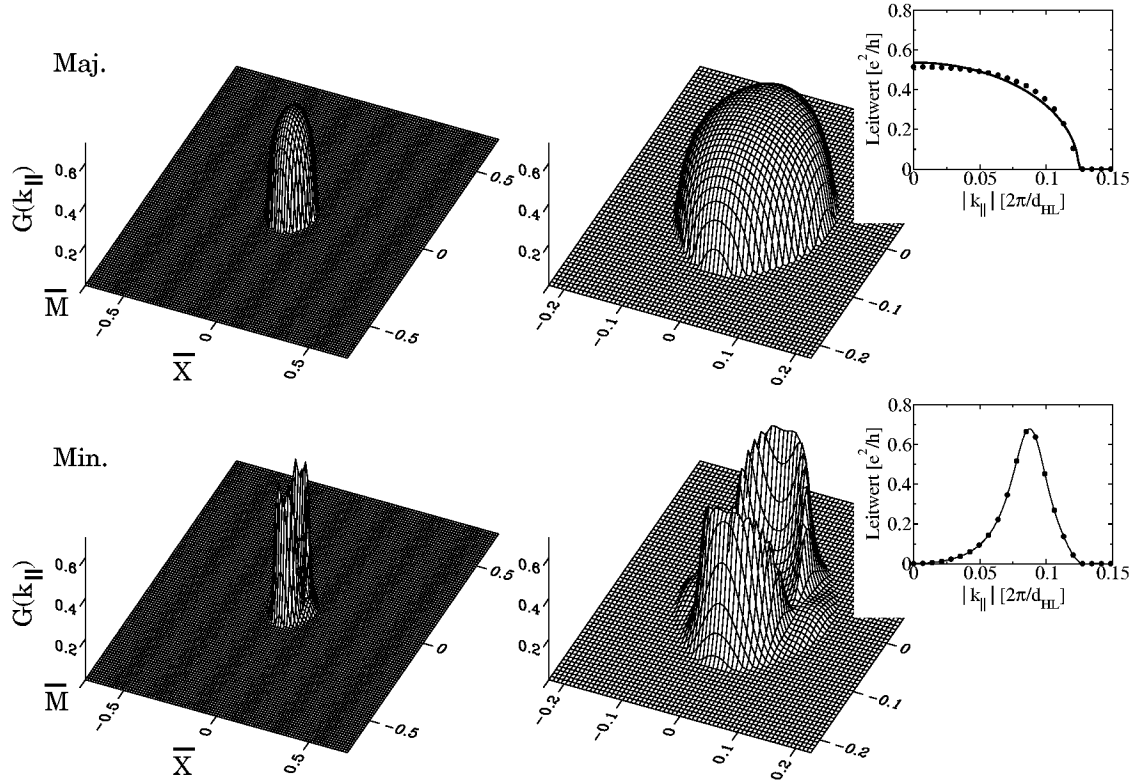


Abbildung 6.13: $k_{||}$ aufgelöste, heiße Spininjektion für Fe/ZnSe(001) mit einer abrupten Zn terminierten Grenzfläche für Majoritäts- (oben) und Minoritätselektronen (unten). Die Energie der injizierten Elektronen beträgt $E_{LB} + 500\text{meV}$. Die linken Spalte zeigt die gesamte 2DBZ und die rechte den Bereich um den $\bar{\Gamma}$ Punkt vergrößert. Die Diagramme rechts stellen einen Schnitt entlang $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} dar. Die reziproken Vektoren sind in Einheiten von $2\pi/d_{HL}$ und die Leitwerte in e^2/h angegeben.

mehr erfüllt, wodurch Fe Zustände aus der gesamten 2DBZ in das LB am $\bar{\Gamma}$ Punkt streuen können. Dieser Effekt ist in einer *ab initio* Untersuchung [117] nachgewiesen worden. Dabei wurde gefunden, dass bereits etwa eine 10 prozentige Grenzflächendiffusion ausreicht, um den Leitwert im Minoritätsband so stark ansteigen zu lassen, dass die Spinpolarisation nahezu vollständig unterdrückt wird.

$k_{||}$ aufgelöste heiße Spininjektion

In diesem Abschnitt wird die heiße Spininjektion nicht nur am $\bar{\Gamma}$ Punkt, sondern in Abhängigkeit von $k_{||}$ betrachtet. Für Zustände mit $k_{||} \neq 0$ sind die obigen Symmetrieargumente nicht mehr gültig, so dass weitere Bänder an das LB koppeln können. Das betrifft besonders das Minoritätsband, was einen höheren Leitwert und eine geringere Spinpolarisation zur Folge hat. Abbildung 6.13 zeigt die $k_{||}$ aufgelöste heiße Spininjektion für eine Zn ter-

$E - E_{LB}$ (meV)	E (eV)	$G_{\bar{\Gamma}}^{\uparrow} (e^2/h)$	$G_{\bar{\Gamma}}^{\downarrow} (e^2/h)$	$P_{\bar{\Gamma}}$	P_{2DBZ}
10	10.58	0.051	3.4×10^{-4}	98.7%	98.6%
100	10.67	0.31	2.5×10^{-3}	98.4%	97.5%
500	11.07	0.52	8.1×10^{-4}	99.7%	39.5%
1000	11.57	0.47	0.58	-10.5%	7.0%

Tabelle 6.3: Leitwert und Spinpolarisation bei der heißen Spininjektion in Fe/ZnSe(001) mit einer abrupten Zn terminierten Grenzfläche. Gezeigt ist die Spinpolarisation für verschiedene Energien ($E - E_{LB}$) am $\bar{\Gamma}$ Punkt ($P_{\bar{\Gamma}}$) und integriert über die 2DBZ (P_{2DBZ}). Zusätzlich sind die Leitwerte am $\bar{\Gamma}$ Punkt für Majoritäts- ($G_{\bar{\Gamma}}^{\uparrow}$) und Minoritätsspins ($G_{\bar{\Gamma}}^{\downarrow}$) aufgelistet.

minierte Fe/ZnSe(001) Grenzfläche. In der mittleren Spalte ist der Bereich um den $\bar{\Gamma}$ Punkt vergrößert dargestellt. Die Energie der injizierten Elektronen beträgt $E = E_{LB} + 500\text{meV} = 11.07\text{eV}$ und der Fermiwellenvektor im Bulk HL für diese Energie $k_F = 0.12 \times 2\pi/d_{\text{HL}}$. Der Leitwert im Majoritätsband zeigt am $\bar{\Gamma}$ Punkt ein Maximum von $0.52e^2/h$ und fällt für größere \mathbf{k}_{\parallel} Werte ab. Das Verhalten ähnelt dem von freien Elektronen, die über eine Potentialstufe laufen (siehe Abschnitt 6.2.2). Für diese wird ein Verhalten von

$$G(\mathbf{k}_{\parallel}) \propto k_z = \sqrt{k_F^2 - \mathbf{k}_{\parallel}^2} \quad (6.10)$$

erwartet. Ein Schnitt durch die berechneten Leitwerte (Punkte) entlang $\bar{\Gamma}-\bar{X}$ ist in Abbildung 6.13 rechts oben zusammen mit dem freien Elektronenverhalten (Linie) eingezeichnet. Dieses Verhalten liegt an den rotationssymmetrischen Δ_1 Bändern im Fe Majoritätsband und dem HL LB, die fast freies Elektronenverhalten besitzen. Daher kann auch in dem \mathbf{k}_{\parallel} aufgelösten Leitwertbild annähernd die volle Rotationssymmetrie um die [001] Achse beobachtet werden.

Dagegen zeigt der Leitwert im Minoritätsband ein vollständig anderes Verhalten: Er hat am $\bar{\Gamma}$ Punkt mit $8.1 \times 10^{-4}e^2/h$ ein Minimum und steigt für größere \mathbf{k}_{\parallel} Werte um mehrere Größenordnungen bis auf etwa $0.7e^2/h$ steil an (siehe Schnitt entlang $\bar{\Gamma}-\bar{X}$). Außerdem besitzt der Leitwert nur eine reduzierte C_{2v} Symmetrie, welche von den Fe d Minoritätsbänder hervorgerufen wird. Die $\bar{\Gamma}-\bar{X}$ Richtung, in der das ausgeprägte Maximum liegt, ist vom Fe aus die Richtung zu den nächsten HL Atomen (siehe 2DBZ in Abbildung 6.6). Für Zustände mit $\mathbf{k}_{\parallel} \neq 0$ dürfen weitere Fe Bänder an das LB ankoppeln, da sie nicht mehr aus Symmetriegründen verboten sind. Wird der Leitwert über die gesamte 2DBZ integriert, so reduziert sich daher die Polarisation je höher die Energie im LB liegt.

Die berechneten Leitwerte und die Polarisationen für Majoritäts- und Minoritätselektronen am $\bar{\Gamma}$ Punkt sowie die Polarisation integriert über die gesamte 2DBZ sind in der Tabelle 6.3 für verschiedene Energien aufgelistet. Daraus kann erkannt werden, dass für Fermienergien bis zu 100meV oberhalb des LBM der Unterschied zwischen der Spinpolarisation am $\bar{\Gamma}$ Punkt und der einer Integration über die 2DBZ vernachlässigbar ist. Für $E = E_{LB} + 1000\text{meV}$ existiert auch für Minoritätselektronen ein Fe Δ_1 Band, womit sich

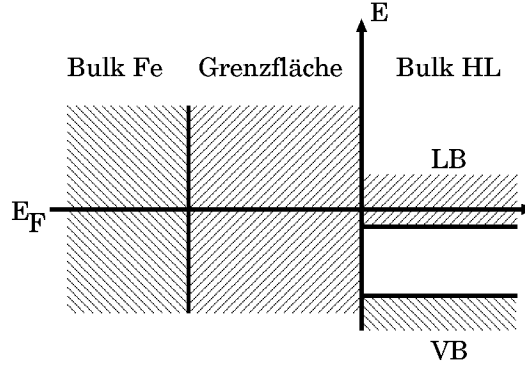


Abbildung 6.14: Schematische Lage der Bänder bei der thermischen Spininjektion bei $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$. Die Energie der injizierten Elektronen entspricht der Fermienergie.

der hohe Leitwert im Minoritätsband und die negative Spinpolarisation am $\bar{\Gamma}$ Punkt ($P_{\bar{\Gamma}}$) erklärt.

In typischen Anwendungen liegt die Fermienergie etwa in der Größenordnung von 10meV im LB [113]. Mit den hier gezeigten Ergebnissen ist es daher gerechtfertigt, bei diesen Energien die Spinpolarisation nur am $\bar{\Gamma}$ zu diskutieren. Der Grund hierfür liegt in der geringen effektiven Masse der Elektronen in ZnSe und besonders in GaAs, wodurch der Fermiwellenvektor bei einer Energie 10meV oberhalb des LBM nur eine sehr kleine Länge von etwa einem Hundertstel der Ausdehnung der 2DBZ besitzt.

6.2.2 Thermische Spininjektion

In diesem Kapitel wird die ballistische Spininjektion von thermischen Elektronen mit Energien an der Fermienergie in Fe/ZnSe(001) und Fe/GaAs(001) untersucht. Um diese in den HL Halbraum injizieren zu können, werden die Bulk HL Potentiale von der dritten ML ab der Grenzfläche an energetisch so verschoben, dass die Fermienergie (E_F) typischerweise einige 10meV oberhalb des LBM (E_{LB}) liegt. Die Lage der Bänder ist in Abbildung 6.14 skizziert. Damit soll z.B. eine n -Dotierung des HL oder eine positive Gate-Spannung im Feld-Effekt-Transistor simuliert werden. Die Potentiale der ersten beiden HL ML bleiben unverändert, da sie von der Grenzfläche bestimmt werden.

In den Abbildungen 6.15 und 6.16 sind die berechneten Leitwerte für Fe/ZnSe(001) und Fe/GaAs(001) für verschiedene Werte von $E_F - E_{LB}$ dargestellt. Hier wird wiederum der Leitwert nur am $\bar{\Gamma}$ Punkt ausgewertet. Dies ist gerechtfertigt, da die Fermienergie nur einige 10meV im LB liegt und so die Abweichung von der Polarisation bei einer korrekten Integration über der gesamten 2DBZ vernachlässigt werden kann (siehe Abschnitt 6.2.1). In den Bildern ist oben die abrupte Zn- bzw. Ga-Terminierung, in der Mitte die diffundierte Zn- bzw. Ga Grenzfläche und unten die Se- bzw. As-Terminierung dargestellt. Zunächst werden die abrupten Grenzflächen diskutiert. Bei allen vier möglichen Terminierungen steigt der Leitwert für Majoritätselektronen innerhalb weniger 10meV auf Werte oberhalb

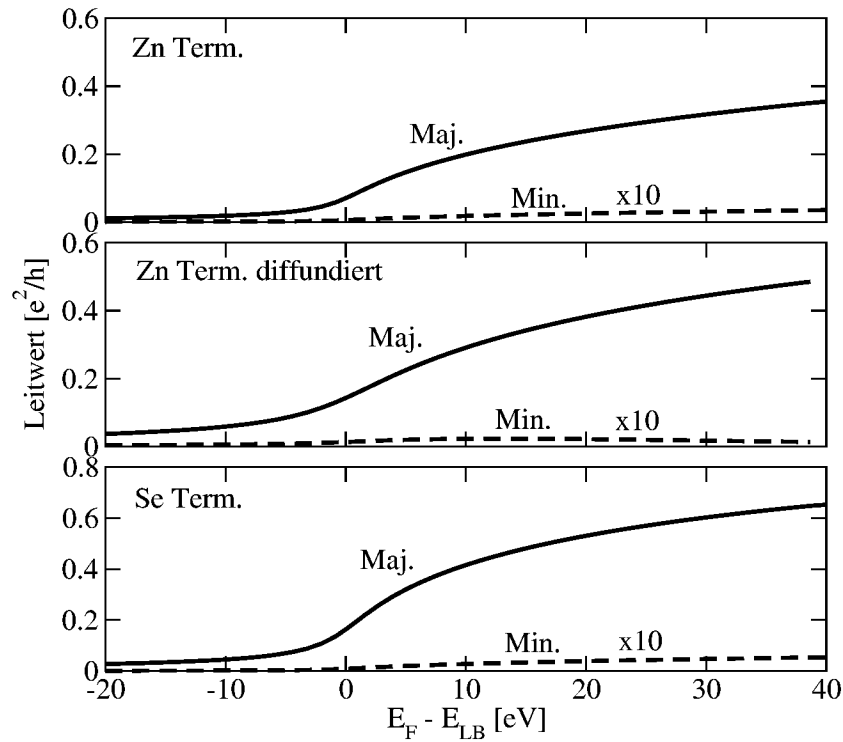


Abbildung 6.15: Thermische Spininjektion von Fe in ZnSe(001) am $\bar{\Gamma}$ Punkt für eine abrupte Zn (oben), eine diffundierte Zn (Mitte) und eine Se (unten) terminierte Grenzfläche. Ausgezogene Linien zeigen die Leitwerte für Majoritäts- und gestrichelte die für Minoritätselektronen. Die Leitwerte der Minoritätselektronen sind zur besseren Sichtbarkeit mit dem angegebenen Faktor multipliziert worden.

von $0.4e^2/h$ an. Dagegen ist der Leitwert im Minoritätsband um mehrere Größenordnungen kleiner (zur besseren Sichtbarkeit ist er mit den angegebenen Faktoren multipliziert worden). Dadurch ergibt sich für den gezeigten Energiebereich eine sehr hohe Spinpolarisation von mehr als 97% für Fe/ZnSe(001) und praktisch 100% für Fe/GaAs(001). Diese hohe Spinpolarisation resultiert, wie im vorherigen Kapitel beschrieben, aus den unterschiedlichen Symmetrien des Fe Δ_1 Zustands im Majoritätsband und des Δ_2' Zustands im Minoritätsband. Dies bedeutet für die ballistische Spininjektion von thermischen Elektronen eine symmetriebedingte hohe Spinpolarisation.

Für die diffundierte Zn-Grenzfläche ergeben sich mit der abrupten Grenzfläche vergleichbare Werte. Jedoch ist ein drastischer Unterschied für die diffundierte Ga-Grenzfläche sichtbar. Dort ist der Leitwert für Minoritätselektronen um mehrere Größenordnungen größer als bei der abrupten Ga Grenzfläche. Der Leitwert der Majoritätselektronen bleibt dagegen praktisch unverändert. Die Ursache hierfür ist eine Resonanz am diffundierten Fe-Atom an der Fermienergie im Minoritätsband, wie sie schon bei der heißen Spininjektion in Fe/GaAs(001) mit einer diffundierten Ga Grenzfläche gefunden wurde (siehe mittleres

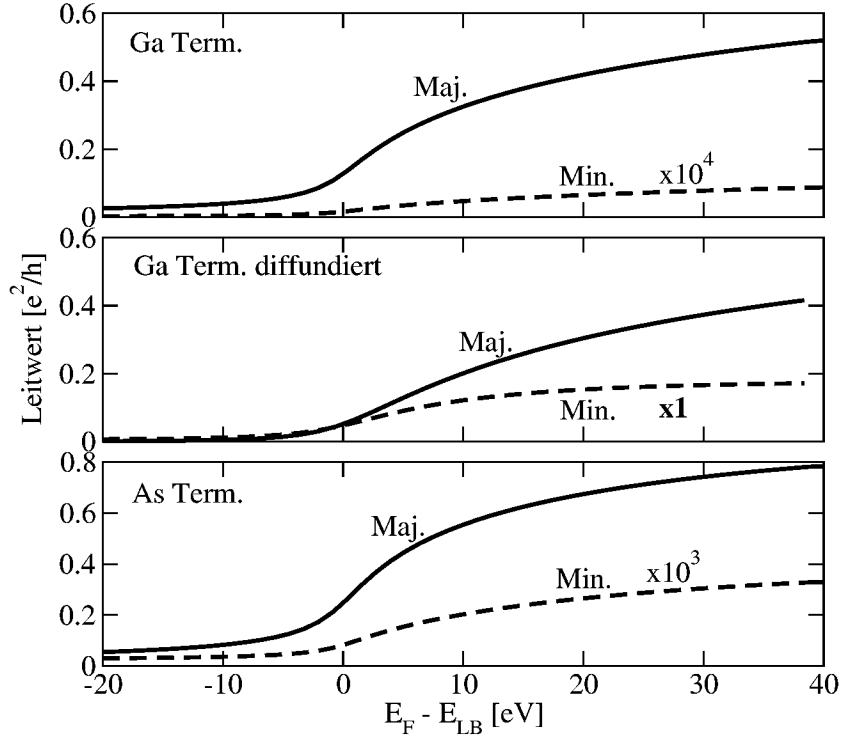


Abbildung 6.16: Thermische Spininjektion von Fe in GaAs(001) am $\bar{\Gamma}$ Punkt für eine abrupte Ga (oben), eine diffundierte Ga (Mitte) und eine As (unten) terminierte Grenzfläche. Ausgezogene Linien zeigen die Leitwerte für Majoritäts- und gestrichelte die für Minoritätselektronen. Die Leitwerte der Minoritätselektronen sind zur besseren Sichtbarkeit mit dem angegebenen Faktor multipliziert worden.

Bild in Abbildung 6.11). Durch diese Resonanz wird der Leitwert der Minoritätselektronen vergrößert, wodurch die Spinpolarisation reduziert wird. Wird die thermische Spininjektion an Fe Zuständen nur 0.3eV oberhalb der Fermienergie durchgeführt, so ist die Spinpolarisation vergleichbar mit der abrupten Ga Grenzfläche, da bei dieser Energie die Resonanz im Minoritätsband nicht mehr wirksam ist.

Aus den Diagrammen wird deutlich, dass der Leitwert bzw. die Transmission am $\bar{\Gamma}$ Punkt oberhalb des LBM nur langsam ansteigt. Die Ursache hierfür ist, dass die Gruppengeschwindigkeit v_G am LBM gegen Null geht. Die Gruppengeschwindigkeit lautet (in atomaren Einheiten)

$$v_G = \frac{dE}{dk_z} = \frac{2k_z}{m^*} \propto \sqrt{E_F - E_{LB}}, \quad (6.11)$$

wobei die effektive Massennäherung $E = k_z^2/m^*$ mit der effektiven Masse der Elektronen im LB m^* benutzt wurde. Da die Transmission proportional zur Gruppengeschwindigkeit ist, kann damit das Wurzelverhalten der Transmission $T \propto \sqrt{E_F - E_{LB}}$ aus den Diagrammen erklärt werden.

Qualitativ kann der Effekt auch anhand einer Potentialstufe und freien Elektronen erläutert werden. Das Potential soll folgenden Verlauf haben

$$V(z) = \begin{cases} V_B, & z \geq 0 \\ 0, & z < 0, \end{cases} \quad (6.12)$$

wobei V_B die Potentialhöhe der Stufe ist. Dabei beschreibt der linke Halbraum ($z < 0$) den Fe und der rechte ($z \geq 0$) den HL Halbraum. Die Höhe der Potentialstufe entspricht dem LBM des HL. Von links laufe eine ebene Welle $\varphi_{k_z}^{\text{ein}}(z) = e^{ik_z z}$ mit einer Energie $E = k_z^2$ (atomare Einheiten) oberhalb der Potentialstufe V_B ein. Diese wird an der Potentialstufe teilweise in eine nach links laufende Welle reflektiert und in eine nach rechts laufende Welle transmittiert. Die transmittierte Welle $\varphi_{k_z}^{\text{trans}}(z) = t e^{ik'_z z}$ mit der Transmissionsamplitude t hat eine Energie von $E = V_B + k'_z{}^2$. Da die einlaufende und die transmittierte Welle unterschiedliche Stromdichten besitzen, muss die Transmissionswahrscheinlichkeit auf die Stromdichte normiert werden. Damit ergibt sich

$$T = \frac{4k_z k'_z}{(k_z + k'_z)^2}. \quad (6.13)$$

Für injizierte Elektronen knapp oberhalb der Potentialbarriere $E > V_B$ bzw. für $k'_z \ll k_z$ kann die Transmissionswahrscheinlichkeit genähert werden

$$T \xrightarrow{k'_z \ll k_z} \frac{4k'_z}{k_z + 2k'_z} \propto \sqrt{E - V_B}. \quad (6.14)$$

Es wird ein wurzelartiges Ansteigen der Transmission gefunden, wie es auch in den *ab initio* Ergebnissen für Energien knapp oberhalb des LBM beobachtet wird.

Dieses Wurzelverhalten gilt für die Transmission bzw. den Leitwert am $\bar{\Gamma}$ Punkt. Wird dagegen die Transmission über die 2DBZ integriert, so ergibt sich für $E = E_F - E_{LB} > 0$ ein Verhalten von

$$\begin{aligned} T_{\text{tot}}(E) &= \int_{2\text{DBZ}} T(\mathbf{k}_{\parallel}) d^2 k_{\parallel} \propto \int_{2\text{DBZ}} k_z(\mathbf{k}_{\parallel}) d^2 k_{\parallel} \\ &= 2\pi \int_{k_{\parallel}=0}^{k_F} \sqrt{k_F^2 - k_{\parallel}^2} k_{\parallel} dk_{\parallel} = \frac{2\pi}{3} E^{3/2}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Dabei ist eine sphärische Fermifläche $E = k_F^2$ und das $T \propto k_z$ Verhalten auch für $\mathbf{k}_{\parallel} \neq 0$ angenommen worden. Dieses $T \propto E^{3/2}$ Verhalten kann in Ref. [117] gefunden werden. Das unterschiedliche Verhalten des Leitwertes am $\bar{\Gamma}$ Punkt und bei der Integration über die 2DBZ gilt nicht für die Spinpolarisation. Sie ist, wie in Abschnitt 6.2.1 gezeigt wurde, am $\bar{\Gamma}$ Punkt vergleichbar mit dem Wert bei einer Integration über die gesamte 2DBZ. Nach Gleichung (6.5) heben sich die unterschiedlichen Verhalten der Leitwerte bei der Berechnung der Spinpolarisation auf. Zum Beispiel besitzt die Spinpolarisation in dem hier gezeigten Energiebereich einen nahezu konstanten Wert.

In den Diagrammen kann ein nichtverschwindender Leitwert für Energien in der Bandlücke ($E_F < E_{LB}$) beobachtet werden. Dieser stammt von einem kleinen Imaginärteil der Energie bei der Berechnung der Green-Funktion, woraus eine Lorentzverbreiterung des Leitwertes resultiert (siehe Anhang B).

6.2.3 Spininjektion durch eine Schottkybarriere

In analytischen Berechnungen für die diffusive Spininjektion [34, 35] konnte gezeigt werden, dass das “fundamentale Hindernis” (siehe Abschnitt 6.1) der Spininjektion [33] durch einen spinabhängigen Grenzflächenwiderstand überwunden werden kann. Aus Experimenten und *ab initio* Berechnungen von Tunnelmagnetowiderständen ist bekannt, dass eine Tunnelbarriere zwischen zwei FM einen solchen spinabhängigen Widerstand besitzt. Inzwischen konnte die Spininjektion von einem FM in einen HL sowohl mit einer intrinsischen Schottkybarriere [36, 37, 102], als auch mit einer extrinsischen Al_2O_3 Barriere [103, 104] experimentell nachgewiesen werden.

In diesem Abschnitt soll der Einfluss einer Schottkybarriere auf die ballistische Spininjektion von thermischen Elektronen in Fe/ZnSe(001) und Fe/GaAs(001) untersucht werden. Da auch bei einem diffusiven Stromtransport im FM und im HL der Tunnelprozess durch die Barriere als ballistisch angenommen werden kann, können die hier gewonnenen Ergebnisse auch auf die analytischen Modelle der diffusiven Spininjektion übertragen werden. In den Experimenten wird die Schottkybarriere möglichst dünn hergestellt, um das ballistische Tunneln zu ermöglichen und die unerwünschte thermionische Emission über die Barriere zu reduzieren. Die Dicke der Schottkybarriere hängt von vielen Parametern, wie z.B. von der Dotierungskonzentration des HL, von der Größe und der Richtung der angelegten Bias-Spannung etc., ab. In Ref. [37] wurde durch eine hohe n -Dotierung von etwa 10^{-19}cm^{-3} innerhalb einer 15nm dicken Schicht eine sehr dünne Schottkybarriere realisiert. Es wurde nachgewiesen, dass der gewünschte Tunnelprozess und nicht die thermionische Emission der dominierende Mechanismus beim Überqueren der Schottkybarriere ist. Durch Anpassung der Strom-Spannungs-Kennlinie an ein Modell für nichtsymmetrische Barrieren wurde für diese Schottkybarrieren eine mittlere Dicke von 0.29nm bestimmt [37].

In dieser Arbeit wird eine Schottkybarriere simuliert, indem die Potentiale an der Grenzfläche so verschoben werden, dass dort die Fermienergie in der Mitte der Bandlücke liegt. Diese Potentialbarriere wird in Richtung des Bulk HL linear über viele Monolagen erniedrigt, bis die Fermienergie wieder 10meV oberhalb des LBM liegt. Der Verlauf der Energiebänder im HL ist schematisch in Abbildung 6.17 skizziert. Der berechnete Leitwert und die Spinpolarisation ist in Abbildung 6.18 für Fe/ZnSe(001) (links) und für Fe/GaAs(001) (rechts) mit Schottkybarrierendicken von 8 – 144 ML dargestellt. Da die Fermienergie nur 10meV im LB liegt, wird der Leitwert nur am $\bar{\Gamma}$ Punkt bestimmt. Das wichtigste Ergebnis ist, dass eine Schottkybarriere eine hohe Spinabhängigkeit aufweist. Außer der Zn terminierten Fe/ZnSe(001) Grenzfläche ist die Spinpolarisation größer als 97% für alle berechneten Barrierendicken. Damit ergibt die Spininjektion durch eine Schottkybarriere ähnlich hohe Polarisierungen wie bei der thermischen Spininjektion ohne Barriere. Der Grund hierfür liegt in der komplexen Bandstruktur von ZnSe und GaAs am $\bar{\Gamma}$ Punkt.

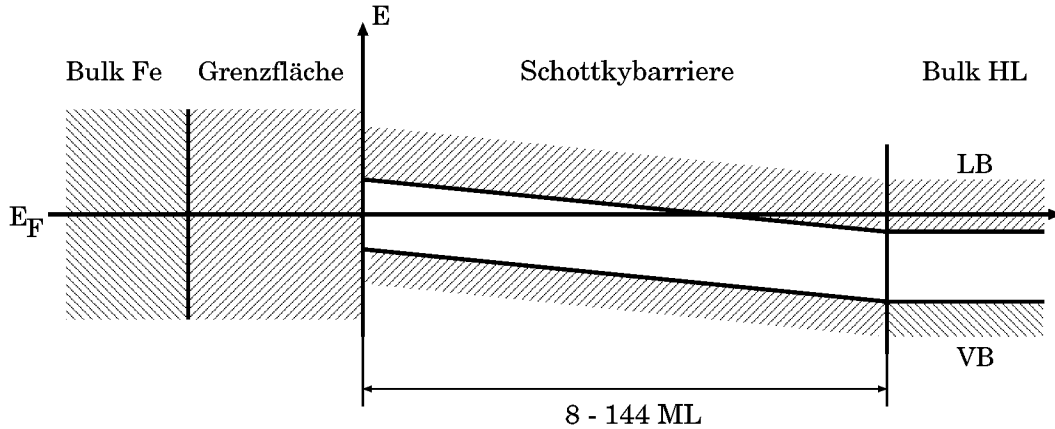


Abbildung 6.17: Lage der Bänder bei $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ für die thermische Spininjektion durch eine Schottkybarriere. Die Energie der injizierten Elektronen entspricht der Fermienergie.

Das komplexe Band in der Bandlücke mit dem kleinsten Imaginärteil, d.h. mit der kleinsten Dämpfungskonstante, besitzt eine $\Delta_1(C_{2v})$ Symmetrie [86]. Das bedeutet, dass für große Barrierendicken (asymptotischer Grenzfall) nur noch Blochelektronen mit $\Delta_1(C_{2v})$ Symmetrie die Barriere durchdringen können. So können die Majoritätselektronen die Tunnelbarriere viel leichter durchqueren als die Minoritätselektronen. Damit lassen sich alle bisherigen Symmetrieüberlegungen auch auf die Spininjektion durch eine Schottkybarriere übertragen. Daher ergibt sich dieselbe symmetriebedingte hohe Spinpolarisation wie bei der thermischen Spininjektion. Die Symmetrieüberlegungen können auch qualitativ auf extrinsische Tunnelbarrieren angewendet werden, falls in der komplexen Bandstruktur der Barriere das Band mit dem kleinsten Imaginärteil am $\bar{\Gamma}$ Punkt ebenfalls eine Δ_1 Symmetrie besitzt. Die ist beispielsweise bei einer Fe/ZnSe/GaAs(001) Heterostruktur mit einer extrinsischen ZnSe Tunnelbarriere der Fall. So könnte auch die reaktive Fe/GaAs Grenzfläche durch eine weniger reaktive Fe/ZnSe Grenzfläche ersetzt werden.

Bei der Injektion durch eine Schottkybarriere mit einer Zn terminierten Fe/ZnSe(001) Grenzfläche fällt die Spinpolarisation mit größer werdender Barrierendicke auf unter 80% ab. Der Grund hierfür ist der Einfluss eines Grenzflächenzustands im Minoritätsband, der für einen höheren Leitwert der Minoritätselektronen und somit für eine Reduzierung der Spinpolarisation sorgt. Dieser Grenzflächenzustand im Minoritätsband liegt in der Fe $\Delta_1(C_{4v})$ Bandlücke (s - d Hybridisierungslücke) und besitzt eine $\Delta_1(C_{4v})$ Symmetrie. Daher koppelt er gut an das HL $\Delta_1(C_{2v})$ LB an. Der Zustand ist für eine freie Fe(001) Oberfläche ein lokalisierter Oberflächenzustand, d.h. er fällt exponentiell auf beiden Seiten der Oberfläche ab, da er an kein Fe Band ankoppeln kann. Hier jedoch kann er aufgrund der reduzierten C_{2v} Symmetrie der Grenzfläche an das Fe $\Delta_{2'}(C_{4v})$ Band ankoppeln, wodurch er zu einem resonanten Grenzflächenzustand wird. Sein Einfluss auf den Leitwert im Minoritätsband ist ebenfalls in Fe/GaAs(001) bei beiden Terminierungen zu erkennen, reduziert aber nur unwesentlich die Spinpolarisation aufgrund des viel größeren Leitwertes der Majo-

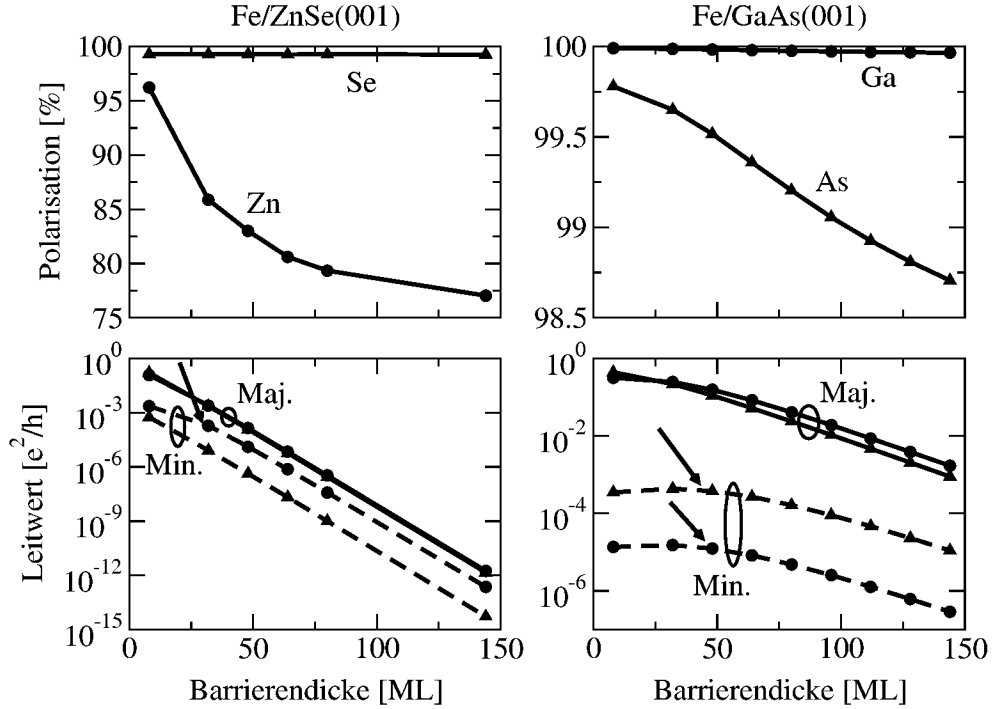


Abbildung 6.18: Thermische Spininjektion durch eine Schottkybarriere in Fe/ZnSe(001) (links) und Fe/GaAs(001) (rechts) in Abhängigkeit der Barrierendicke. Die abrupte Zn bzw. Ga Terminierung ist mit Kreisen und die Se bzw. As Terminierung mit Dreiecken eingezeichnet. Oben ist die Polarisierung und unten der Leitwert am $\bar{\Gamma}$ Punkt für Majoritäts- (durchgezogene Linien) und Minoritätselektronen (gestrichelte Linien) dargestellt. Für Fe/ZnSe(001) liegen die beiden Leitwertkurven der Majoritätselektronen übereinander. Pfeile zeigen den Einfluss des resonanten Grenzflächenzustandes im Minoritätsband.

ritätselektronen gegenüber dem der Minoritätselektronen. Für große Barrierendicken wird eine konstante Spinpolarisation erwartet, da sowohl die Fe Δ_1 Majoritätselektronen wie auch die Fe Minoritätselektronen in dem Δ_1 Grenzflächenzustand dieselbe Abklingkonstante in der Schottkybarriere erfahren. Bei der Se Terminierung lässt sich der Einfluss des resonanten Grenzflächenzustands nicht erkennen, da er energetisch zu tief liegt.

Der resonante Grenzflächenzustand lässt sich in einer monolagenaufgelösten Zustandsdichte erkennen. Die Zustandsdichte von Fe/ZnSe(001) ist in Abbildung 6.19 mit der Zn- (oben) und der Se-Terminierung (unten) dargestellt. Die Potentiale sind hierbei wie bei der heißen Spininjektion verschoben (siehe Abbildung 6.5). Das bedeutet, dass die Fermienergie im HL in der Mitte der Bandlücke liegt und dass keine Schottkybarriere vorhanden ist. Bei der Zn terminierten Grenzfläche ist etwa 60meV unterhalb der Fermienergie der Grenzflächenzustand im Minoritätsband zu erkennen. Wird nun an der Grenzfläche eine Schottkybarriere eingefügt und liegt die Fermienergie 10meV oberhalb des LBM (siehe Abbildung 6.17), so kann der Grenzflächenzustand mit dem LB auf der anderen Seite

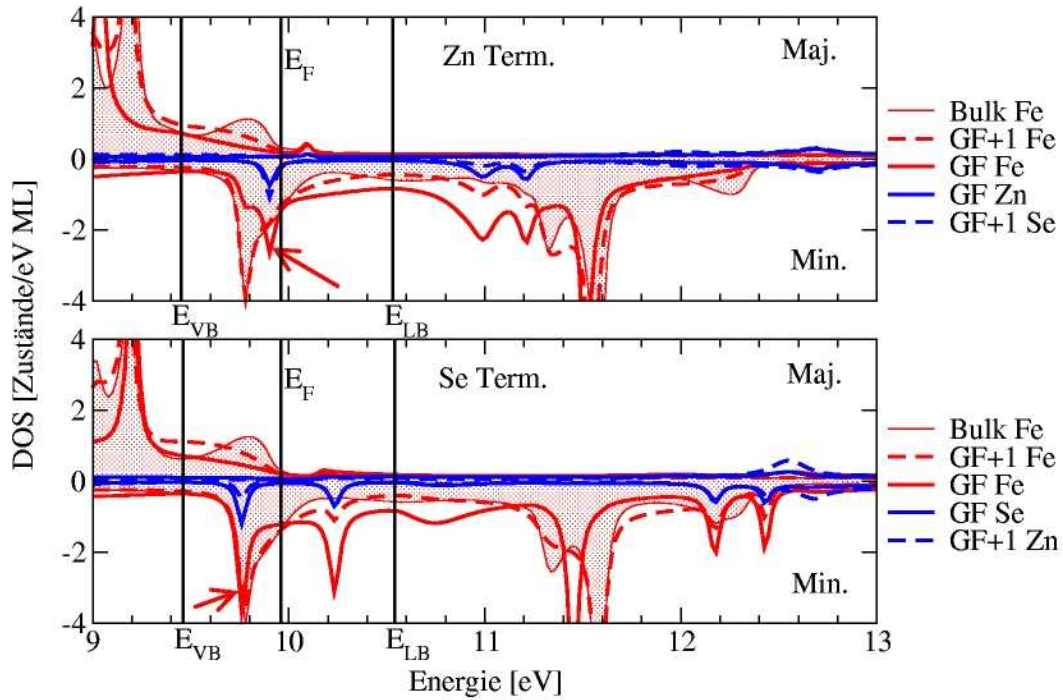


Abbildung 6.19: Monolagenaufgelöste Zustandsdichte (DOS) für eine Fe/ZnSe(001) Heterostruktur ohne Schottkybarriere am $\bar{\Gamma}$ Punkt. Dargestellt ist die abrupte Zn (oben) und Se (unten) terminierte Grenzfläche. Eine positive Zustandsdichte steht für Majoritäts- und eine negative für Minoritätselektronen. Es wird die Grenzflächenmonolage (GF) und die erste benachbarte Monolage (GF+1) gezeigt. Rote Kurven beschreiben Fe- und blaue Halbleitermonolagen. Rot schraffiert zeigt eine Bulk Fe ML. Die senkrechten Linien geben die Lage des Valenzbandmaximums E_{VB} , der Fermienergie E_F und des Leitungsbandminimums E_{LB} im Bulk ZnSe an (von links nach rechts). Der resonante Grenzflächenzustand ist durch einen roten Pfeil gekennzeichnet.

der Barriere wechselwirken. Aufgrund dieser Wechselwirkung verschiebt sich der Zustand zu niedrigeren Energien. Wird die Barrierendicke verkleinert, so wird die Wechselwirkung größer, und der Zustand wird weiter von der Fermienergie weggeschoben. Diese Abhängigkeit ist in der Zustandsdichte der Grenzflächenresonanz in Abbildung 6.20 zu erkennen. Es ist die Fe Grenzflächenmonolage für unterschiedliche Schottkybarrierendicken gezeigt. Dabei wurde ein für alle Dicken gleicher Untergrund in der Zustandsdichte abgezogen, der von den übrigen Fe Zuständen hervorgerufen wird. Deutlich ist eine Verschiebung des resonanten Grenzflächenzustandes bei einer dickeren Schottkybarriere zur Fermienergie hin zu erkennen. Je dicker die Barriere, desto geringer ist die Wechselwirkung mit dem LB, und desto näher liegt die Grenzflächenresonanz an der Fermienergie. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass die Potentiale aufgrund der Systemgröße nicht selbstkonsistent relaxiert wurden. Mit diesen Zustandsdichten lässt sich das Abfallen der Spinpolarisation mit

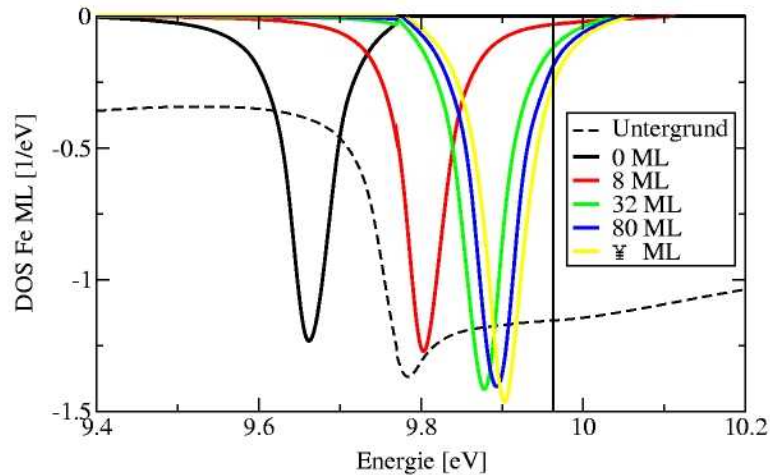


Abbildung 6.20: Verschiebung der Grenzflächenresonanz für unterschiedliche Dicken der Schottkybarriere in Fe/ZnSe(001) mit einer abrupten Zn terminierten Grenzfläche. Es ist die Zustandsdichte (DOS) der Grenzflächenresonanz im Minoritätsband in der Fe Grenzflächenmonolage gezeigt. Die DOS der übrigen Fe Zustände ist vorher von der gesamten Zustandsdichte abgezogen worden (gestrichelte Linie). Die Fermienergie ist durch eine senkrechte Linie markiert.

dickerer Schottkybarriere durch den erhöhten Leitwert der Minoritätselektronen in dem resonanten Grenzflächenzustand erklären (siehe Abbildung 6.18).

Im Falle der Se Terminierung (unteres Bild in Abbildung 6.19) liegt der Grenzflächenzustand etwa 200 meV unterhalb der Fermienergie. Wird nun eine Schottkybarriere an der Grenzfläche eingefügt, so wird die Grenzflächenresonanz noch weiter von der Fermienergie weggeschoben. Daher ist in dem Leitwert bei der Se Terminierung (Abbildung 6.18) für alle Barrierdicken kein Einfluss der Resonanz erkennenbar und die Spinpolarisation konstant.

Die monolagenaufgelöste Zustandsdichte von Fe/GaAs(001) (siehe Abbildung 6.21) besitzt qualitativ dieselben Eigenschaften wie die von Fe/ZnSe(001). Hier liegt jedoch bei beiden Terminierungen, bei der Ga- und der As-Terminierung, der resonante Grenzflächenzustand in der Nähe der Fermienergie. Daher kann in Abbildung 6.18 für beide Terminierungen ein Anstieg des Leitwertes bei einer Vergrößerung der Tunnelbarriere durch den verstärkten Strom durch den Resonanzzustand beobachtet werden. Sein Einfluss auf die Spinpolarisation ist allerdings aufgrund des sehr viel höheren Leitwerts im Majoritätsband vernachlässigbar.

Einfluss der Position der Fermienergie in der Bandlücke

Bei den meisten Metall/HL Kontakten wird die Fermienergie aus Gründen der Ladungsneutralität der MIGS⁸ an der Grenzfläche in der Mitte der Bandlücke fixiert. Daher wurde

⁸Englisch: *Metal Induced Gap States*

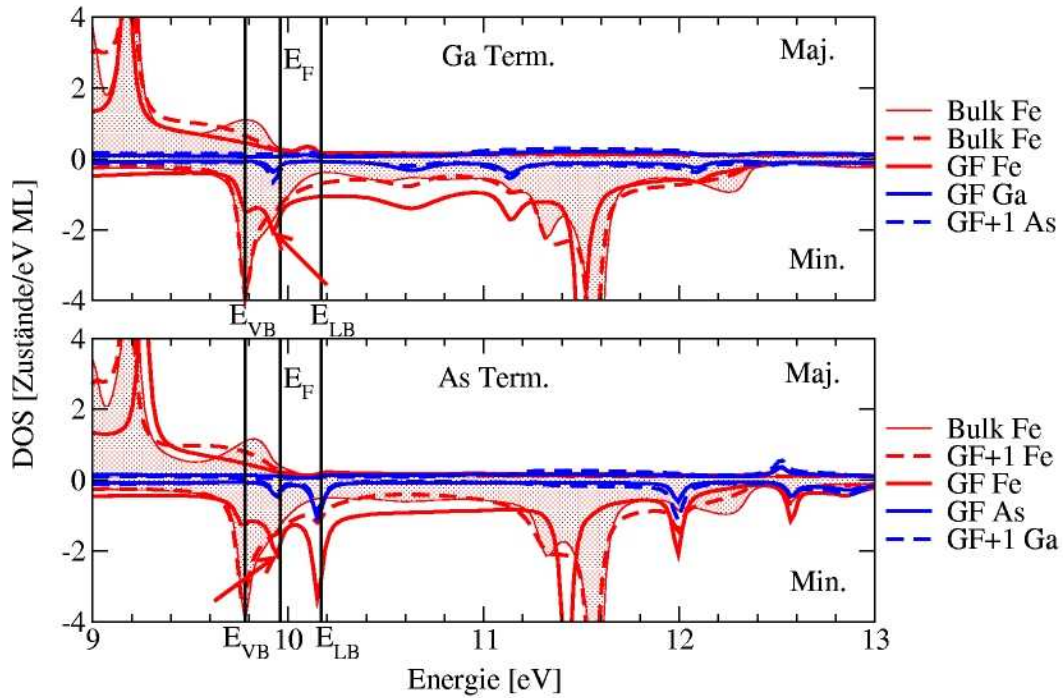


Abbildung 6.21: Monolagenaufgelöste Zustandsdichte (DOS) für eine Fe/GaAs(001) Heterostruktur ohne Schottkybarriere am $\bar{\Gamma}$ Punkt. Dargestellt ist die abrupte Ga (oben) und As (unten) terminierte Grenzfläche. Eine positive Zustandsdichte steht für Majoritätselektronen und eine negative für Minoritätselektronen. Es wird die Grenzflächenmonolage (GF) und die erste benachbarte Monolage (GF+1) gezeigt. Rote Kurven beschreiben Fe- und blaue Halbleitermonolagen. Rot schraffiert zeigt eine Bulk Fe ML. Die senkrechten Linien geben die Lage des Valenzbandmaximums E_{VB} , der Fermienergie E_F und des Leitungsbandminimums E_{LB} im Bulk ZnSe an (von links nach rechts). Der resonante Grenzflächenzustand ist durch einen roten Pfeil gekennzeichnet.

sie in den bisherigen Rechnungen auch immer in der Mitte der Bandlücke angenommen. In diesem Unterabschnitt soll nun der Einfluss der Position der Fermienergie in der Bandlücke auf die Polarisation bei der thermischen Spininjektion durch eine Schottkybarriere untersucht werden.

Zum Variieren der Lage der Fermienergie an der Grenzfläche werden die Potentiale an der Grenzfläche zusätzlich energetisch zu höheren oder zu niedrigen Energien verschoben. Schematisch ist dies in Abbildung 6.22 dargestellt. Dabei ist in beiden Bildern gestrichelt die bisherige Position der Fermienergie in der Mitte der Bandlücke angedeutet. Im linken Bild ist die Fermienergie in der Nähe des VB und im rechten in der Nähe des LB fixiert. Die zusätzliche Verschiebung wird in Richtung Bulk HL immer kleiner, so dass dort die Fermienergie wiederum 10 meV im LB liegt. Die Energie der injizierten Elektronen entspricht der Fermienergie (thermische Elektronen). Die berechneten Leitwerte am $\bar{\Gamma}$ Punkt für eine 80

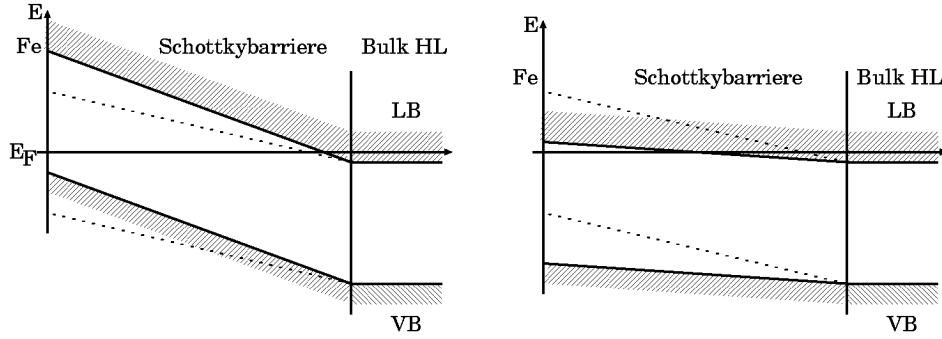


Abbildung 6.22: Schematische Darstellung der unterschiedlichen Positionen der Fermienergie in der Bandlücke an der Fe/HL(001) Grenzfläche. Links ist die Fermienergie in der Nähe des Valenzbandes und rechts in der Nähe des Leitungsbandes fixiert. Gestrichelt ist der bisher angenommene Fall dargestellt, dass die Fermienergie an der Grenzfläche in der Mitte der Bandlücke liegt. Die Energie der injizierten Elektronen entspricht der Fermienergie.

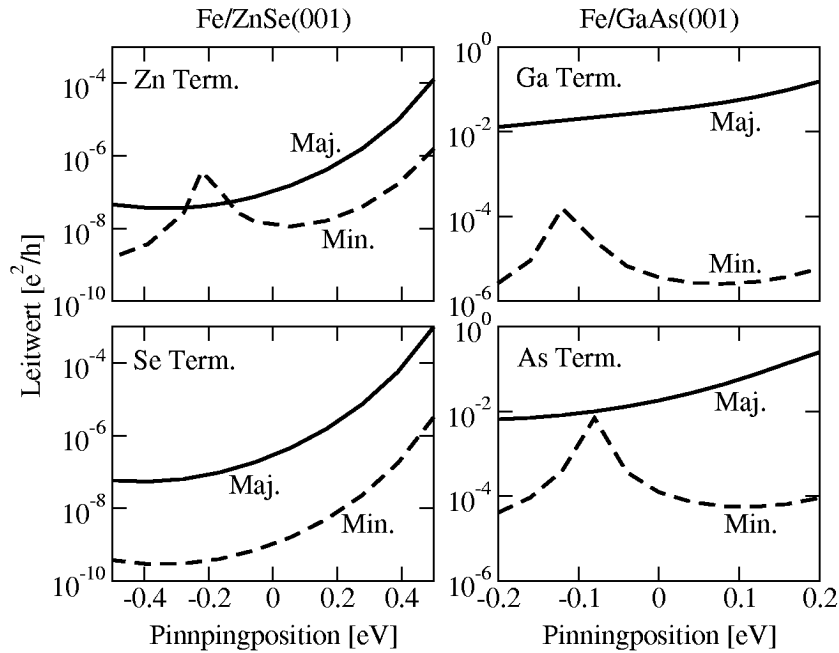


Abbildung 6.23: Einfluss der Position der Fermienergie in der Bandlücke an der Grenzfläche (Pinningposition) auf den Leitwert am $\bar{\Gamma}$ Punkt für Majoritäts- (durchgezogene Linien) und Minoritätselektronen (gestrichelte Linien). In der linken Spalte ist die Fe/ZnSe(001) und in der rechten die Fe/GaAs(001) Heterostruktur abgebildet. Die Dicke der Schottkybarriere beträgt jeweils 80 ML. Der Nullpunkt der Energieskala bedeutet eine Position in der Mitte der Bandlücke.

ML dicke Schottkybarriere sind in Abbildung 6.23 dargestellt. In den Diagrammen ist der

Energienullpunkt so gewählt, dass für ihn die Fermienergie in der Mitte der Bandlücke liegt. Positive Energien bedeuten eine Position in der Nähe des LB (Abbildung 6.22 rechts) und negative eine in der Nähe des VB (Abbildung 6.22 links). Der Anstieg des Leitwertes bei allen Terminierungen zu höheren Energien wird von der kleineren effektiven Barrierendicke und von dem kleineren Imaginärteil des komplexen Wellenvektors zum Rand der Bandlücke [86] verursacht. Außer bei der Se Terminierung lässt sich zusätzlich ein Leitwertmaximum im Minoritätsband beobachten, das von dem resonanten Grenzflächenzustand in der Δ_1 Bandlücke hervorgerufen wird. Bei einer Fermienergie in der Nähe des VB wird die effektive Tunnelbarriere vergrößert und somit der Grenzflächenzustand energetisch zur Fermienergie hin verschoben. Bei der Zn Terminierung ist der Einfluss des Grenzflächenzustands sogar so stark, dass der Leitwert durch die Grenzflächenresonanz im Minoritätsband höher ist als der Leitwert für Majoritätselektronen. Dies bedeutet eine negative Spinpolarisation am $\bar{\Gamma}$ Punkt. Bei der Se Terminierung ist kein Einfluss eines resonanten Grenzflächenzustandes beobachtbar, da dieser energetisch zu tief liegt.

Diese Ergebnisse unterstreichen die Bedeutung der Grenzfläche, da sie die genaue Lage des resonanten Grenzflächenzustandes und der Position der Fermienergie an der Grenzfläche bestimmen. So kann sich schon bei einer kleinen Energieverschiebung der Resonanz um weniger als 0.2eV das Vorzeichen der Spinpolarisation umdrehen.

Grenzflächenwiderstand

Um die Ergebnisse der thermischen Spininjektion durch eine Schottkybarriere in die analytischen Modelle [34, 35] der diffusiven Spininjektion durch eine Tunnelbarriere übernehmen zu können, müssen die berechneten Leitwerte in Grenzflächenwiderstände und in deren Polarisierungen umgerechnet werden. Obwohl die analytischen Modelle einen diffusiven Ladungstransport annehmen, erfolgt die Durchquerung der Grenzfläche mit einer nicht zu dicken Tunnelbarriere ballistisch. Dafür können die hier gewonnen Ergebnisse verwendet werden. Für eine ballistische Grenzfläche zwischen zwei diffusiven Bulk Regionen, wurde in der Literatur [128, 129] eine Bestimmungsgleichung für den Grenzflächenwiderstand AR angegeben

$$AR = \frac{h}{e^2} \left[\frac{1}{T_{\text{tot}}} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{S_{\text{Fe}}} + \frac{1}{S_{\text{HL}}} \right) \right], \quad (6.16)$$

wobei R der Widerstand der Grenzfläche mit der Querschnittsfläche A , T_{tot} die über die 2DBZ integrierte und über beide Spinrichtungen σ und alle Bänder ν summierte Transmissionswahrscheinlichkeit $T_{\nu\nu'}^\sigma(\mathbf{k}_{\parallel})$

$$T_{\text{tot}} = \sum_{\sigma\nu\nu'} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\text{2DBZ}} T_{\nu\nu'}^\sigma(\mathbf{k}_{\parallel}) d^2k_{\parallel} \quad (6.17)$$

und S_X (X steht für Fe oder HL) die auf die 2DBZ projizierte Fermifläche (FF) des entsprechenden Bulk Halbraumes

$$S_X = \sum_{\sigma\nu} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\text{FF}_{\nu}^{\sigma X}} d^2k_{\parallel} \quad (6.18)$$

ist. Für eine mehrbandige Fermifläche (z.B. im Minoritätsband von Fe) muss das Integral über alle Bänder ν summiert werden. Der linke Term auf der rechten Seite von Gleichung (6.16) beinhaltet den Widerstand aufgrund einer ballistischen Reflexion an der Grenzfläche. Der mittlere und rechte Term beschreiben zusammen den ballistischen Kontakt-Widerstand oder auch *spreading resistance* (siehe Kapitel 4). Er wird von der Grenzfläche zwischen der diffusiven Bulk Region und der ballistischen Region hervorgerufen. Hier wird er von dem Grenzflächenwiderstand abgezogen, da er nicht von der hier betrachteten Grenzfläche hervorgerufen wird. So beschreibt die Gleichung (6.16) den verschwindenden Grenzflächenwiderstandes für ein reines Bulk System, z.B. eine ballistische Fe/Fe Grenzfläche zwischen zwei diffusiven Fe Bulk Regionen.

Da die Fermifläche des HL sehr viel kleiner ist als die Fermiflächen vom Fe, kann Gleichung (6.16) vereinfacht werden:

$$\frac{1}{S_{\text{Fe}}} \ll \frac{1}{S_{\text{HL}}}. \quad (6.19)$$

Da schon bei dünnen Tunnelbarrieren die Transmissionswahrscheinlichkeit sehr klein ist ($T_{\nu\nu'}^{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel}) \ll 1$), kann weiter der Einfluss von S_{HL} gegenüber T_{tot} vernachlässigt werden. Damit vereinfacht sich Gleichung (6.16) zu

$$AR = \frac{h}{e^2} \frac{1}{T_{\text{tot}}}. \quad (6.20)$$

Mit dieser Formel kann aus den oben vorgestellten Leitwerten (bzw. Transmissionswahrscheinlichkeiten) der Grenzflächenwiderstand berechnet werden. Zusätzlich wird in den analytischen Modellen die Polarisierung der Grenzfläche benötigt. Diese ist in der Literatur genauso wie in dieser Arbeit definiert (Gleichung (6.5)).

In Abbildung 6.24 sind die nach (6.20) berechneten Grenzflächenwiderstände der Fe/ZnSe(001) und der Fe/GaAs(001) Grenzfläche mit einer Schottkybarriere und deren Polarisierungen dargestellt. In den Diagrammen sind zusätzlich die Grenzflächenwiderstände und die Spinpolarisationen für die thermische Spininjektion ohne Schottkybarriere (siehe Kapitel 6.2.2) eingezeichnet. Die hier erhaltenen Grenzflächenwiderstände⁹ bewegen sich in derselben Größenordnung, wie sie in dem analytischen Modell von Fert und Jaffrès [35] angenommen werden: $AR = 4 \cdot 10^{-9} \Omega \text{m}^2$. Allerdings weist die hier betrachtete Schottkybarriere eine viel höhere Spinabhängigkeit auf als in Ref. [35]. Dort wird die Spinabhängigkeit¹⁰ der Tunnelbarriere mit $P = 0.5$ abgeschätzt, was viel weniger als die hier erhaltenen Polarisierungen ist. Mit diesen Ergebnissen können daher noch höhere Spinpolarisationen im diffusiven Transport erreicht werden, als in Ref. [35] berechnet werden.

Bei der diffusiven Spininjektion von Fe in HL kann das fundamentale Hindernis (siehe Abbildung 6.1) mit Hilfe einer Tunnelbarriere mit einer hohen Spinabhängigkeit überwunden werden. Um dies zu erreichen, muss der Grenzflächenwiderstand der Tunnelbarriere oberhalb einer bestimmten Schranke liegen, damit die chemischen Potentiale für beide

⁹In Ref. [35] mit r_b^* bezeichnet.

¹⁰In Ref. [35] mit γ bezeichnet.

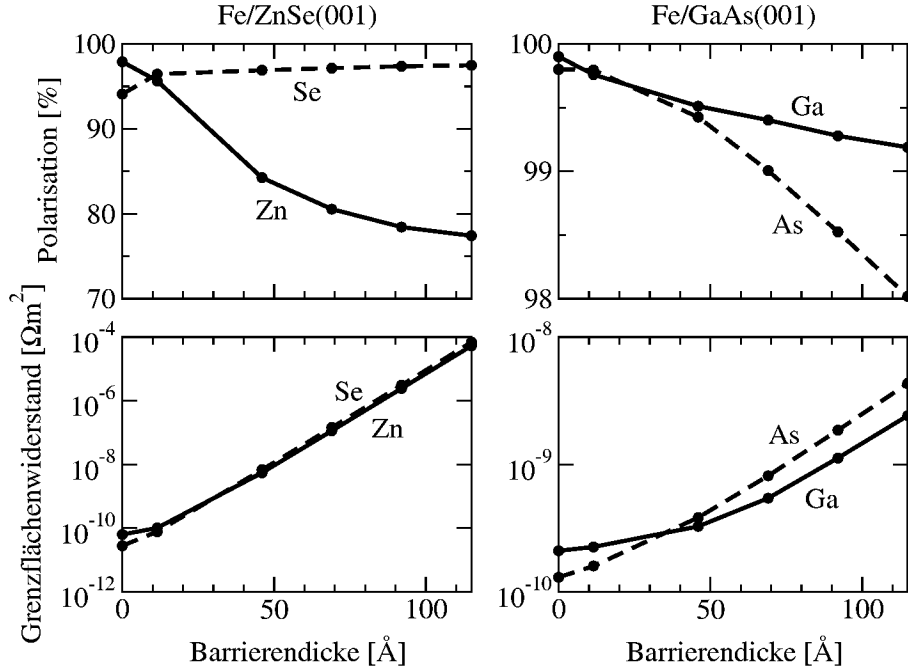


Abbildung 6.24: Spinpolarisation (oben) und Grenzflächenwiderstand (unten) für die thermische Spininjektion durch eine Schottkybarriere in Fe/ZnSe(001) (links) und Fe/GaAs(001) (rechts). Die abrupte Zn bzw. Ga Terminierung wird durch eine durchgezogene Linie und die Se bzw. As Terminierung durch eine gestrichelte Linie beschrieben. Der Leitwert ist nach (6.20) über die 2DBZ integriert worden. Um die Ergebnisse in analytische Rechnungen zu übernehmen, wird die Barrierendicke in Å angegeben.

Spinrichtungen an der Grenzfläche ausreichend weit aufgespalten werden. Ist allerdings der Grenzflächenwiderstand und somit die Aufspaltung zu groß, so nimmt die Wahrscheinlichkeit für Spin-Flip Prozesse im HL zu, woraus eine obere Grenze für den Grenzflächenwiderstand resultiert. In dem analytischen Modell für die diffusive Spininjektion durch eine Tunnelbarriere von Fert und Jaffrès [35] lauten diese beiden Bedingung für den Grenzflächenwiderstand

$$r_N \frac{t_N}{l_N^{\text{sf}}} \ll AR \ll r_N \frac{l_N^{\text{sf}}}{t_N}, \quad (6.21)$$

wobei r_N der Schichtwiderstand des HL, t_N die Dicke der HL Schicht, l_N^{sf} die Spin-Flip Länge im HL und AR der Grenzflächenwiderstand nach (6.20) ist. Mit typischen Werten aus dem analytischen Modell [35] ($r_N = 4 \times 10^{-9} \Omega\text{m}^2$ und $l_N^{\text{sf}} = 2 \mu\text{m}$) sowie einer Dicke der Halbleiterschicht von $t_N = 200 \text{ nm}$ wird folgender Bereich für den Grenzflächenwiderstand berechnet

$$4 \times 10^{-10} \Omega\text{m}^2 \ll AR \ll 4 \times 10^{-8} \Omega\text{m}^2. \quad (6.22)$$

Wird diese Bedingung mit den hier erhaltenen Grenzflächenwiderständen aus Abbildung 6.24 verglichen, so lässt sich erkennen, dass die Bedingung von den hier betrachteten

Schottkybarrierendicken erfüllt wird: in Fe/ZnSe(001) für Dicken von 20 bis 60Å und in Fe/GaAs(001) von 50 bis über 100Å. Allerdings muss berücksichtigt werden, dass die Bandlücke in den Rechnungen etwa halb so groß ist wie die experimentell gemessene, was ein bekanntes Problem der lokalen Dichtenäherung ist. Daher fällt der Leitwert in der Schottkybarriere langsamer als im Experiment ab, so dass sich die tatsächlich benötigte Barrierendicke zu kleineren Werten verschiebt.

Damit ist gezeigt, dass eine ballistische Schottkybarriere zwischen Fe/ZnSe(001) und Fe/GaAs(001) einen stark spinabhängigen Grenzflächenwiderstand besitzt, mit dem das Problem des Leitfähigkeitsunterschiedes ("fundamentales Hindernis") bei der diffusiven Spininjektion sehr effektiv behoben werden kann. Weiter wird deutlich, dass die Ergebnisse der ballistischen Spininjektion durch eine Schottkybarriere ebenfalls für die diffusive Spininjektion sehr wichtig sind, um realistische Angaben über die ballistische Tunnelbarriere machen zu können.

Bias-Spannung

In Experimenten zur Spininjektion wird gewöhnlich eine Bias-Spannung in der Größenordnung von 1V angelegt [102]. Besonders bei einer optischen Detektion der Spinpolarisation, wie sie in Abschnitt 6.1.1 beschrieben ist, wird eine relativ hohe Spannung benötigt, um einen Strom durch die LED in der Größenordnung von 10^{-2} A [102] zu erhalten. Nur so ist der Signal-Rausch-Abstand groß genug. Es wird vermutet, dass bei einer elektrisch detektierten Spinpolarisation, z.B. über eine zweite ferromagnetische Elektrode, der Strom um mehrere Größenordnungen und somit auch die Bias-Spannung reduziert werden kann [130]. Hier soll der Effekt einer Bias-Spannung auf die thermische Spininjektion durch eine Schottkybarriere untersucht werden.

Normalerweise wird in den hier präsentierten Rechnungen der Leitwert als lineare Antwort eines angelegten elektrischen Feldes berechnet und anschließend der Grenzfall betrachtet, dass das elektrische Feld gegen Null geht, d.h. dass die angelegte Spannung infinitesimal klein ist. Dennoch kann eine Bias-Spannung beim ballistischen Transport in dem Landauer-Büttiker Formalismus berücksichtigt werden. Dabei wird eine Energieintegration des Leitwertes über die angelegte Bias-Spannung durchgeführt, da alle Elektronen zwischen E_F und $E_F - eU$ am Ladungstransport teilnehmen

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{1}{eU} \int_{E=0}^{-eU} T(E_F + E) dE, \quad (6.23)$$

wobei U die angelegte Bias-Spannung und $T(E_F + E)$ die gesamte Transmissionswahrscheinlichkeit an der Energie $E_F + E$ ist. Für $U \rightarrow 0$ ergibt sich aus Gleichung (6.23) die bekannte Landauer-Formel (4.10). Die Lage der Bänder bei der Integration ist schematisch in Abbildung 6.25 dargestellt. Da die Bulk Regionen den Strom ideal leiten, fällt die angelegte Spannung über der Schottkybarriere ab, wodurch die Energiebänder in der Barriere zusätzlich verbogen werden. Hier wird eine lineare Bandverbiegung durch die angelegte

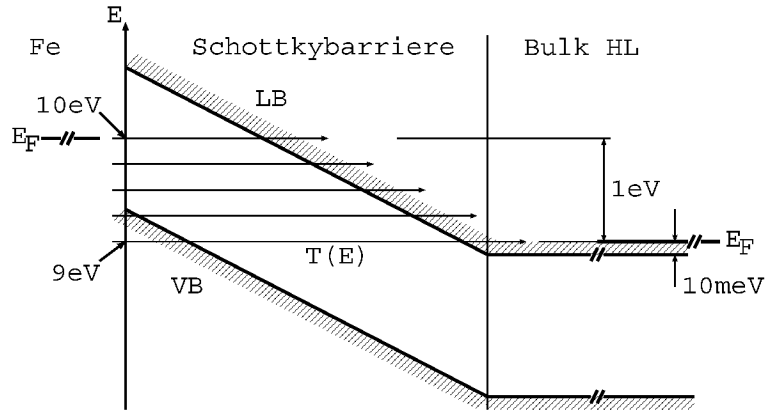


Abbildung 6.25: Lage der Bänder bei der Energieintegration für die Spininjektion mit einer Bias-Spannung von $U = 1\text{V}$. Die Fermienergie liegt im Bulk HL 10meV im LB.

Spannung angenommen. Diese qualitative Zeichnung verdeutlicht bereits, dass für den gesamten Leitwert die Zustände im oberen Energiebereich um 10eV am wichtigsten sind, da für sie die Schottkybarriere effektiv dünner ist als im unteren Energiebereich. Für die Rechnungen wird eine Bias-Spannung von $U = 1\text{V}$, eine Barrierendicke von 8 und 80 ML und eine Fermienergie im Bulk HL von $E_F - E_{LB} = 10\text{meV}$ angenommen. Wegen der angelegten Bias-Spannung muss bei diesen Rechnungen über die 2DBZ integriert werden, da nicht nur Zustände am $\bar{\Gamma}$ Punkt besetzt sind. Aufgrund der Energie- und der \mathbf{k}_{\parallel} -Integration über die 2DBZ gestalten sich die Rechnungen sehr aufwendig.

Der Leitwert in Abhängigkeit der Energie in Fe/ZnSe(001) mit einer abrupten Zn und einer Se Terminierung wird in Abbildung 6.26 gezeigt. Der Leitwert ist in einer logarithmischen Skala angegeben. In den Diagrammen ist der Einfluss des resonanten Grenzflächenzustands im Minoritätsband (siehe Abschnitt 6.2.3) auf den Leitwert durch Pfeile gekennzeichnet. Die Energien dieser Maxima liegen in demselben Bereich wie in den Zustandsdichten (siehe Abbildung 6.19 und 6.21). Hier lässt sich erkennen, dass bei der Se terminierten Grenzfläche (gestrichelte Linien) die Grenzflächenzustände an einer tieferen Energie im Vergleich zu der Zn terminierten Grenzfläche (durchgezogene Linien) liegen. Da für tiefere Energien die Barriere effektiv größer ist, ist der Einfluss der Grenzflächenzustände bei der Se terminierten Grenzfläche kleiner als bei der Zn terminierten. Zu tieferen Energien fällt der Leitwert für beide Spinrichtungen exponentiell ab, was ebenfalls durch die effektiv größere Schottkybarriere hervorgerufen wird (siehe schematische Skizze 6.25). Bei der 80 ML dicken Barriere lässt sich der Einfluss des Valenzbandes erkennen: Bei niedrigen Energien um 9.2eV werden die Elektronen vom Fe direkt in das Valenzband injiziert und tunneln von dort in das LB. Dies kann ebenfalls in der schematischen Zeichnung abgelesen werden. Wie in der Bandstruktur (Abbildung 6.8 links) zu erkennen ist, besitzt das Valenzband der leichten Löcher ebenfalls eine $\Delta_1(C_{2v})$ Symmetrie, so dass die Symmetrieargumente auch im Valenzband gültig sind. Allerdings sind diese Leitwerte für den integrierten Leitwert unwichtig, da sie mehrere Größenordnungen kleiner sind als die

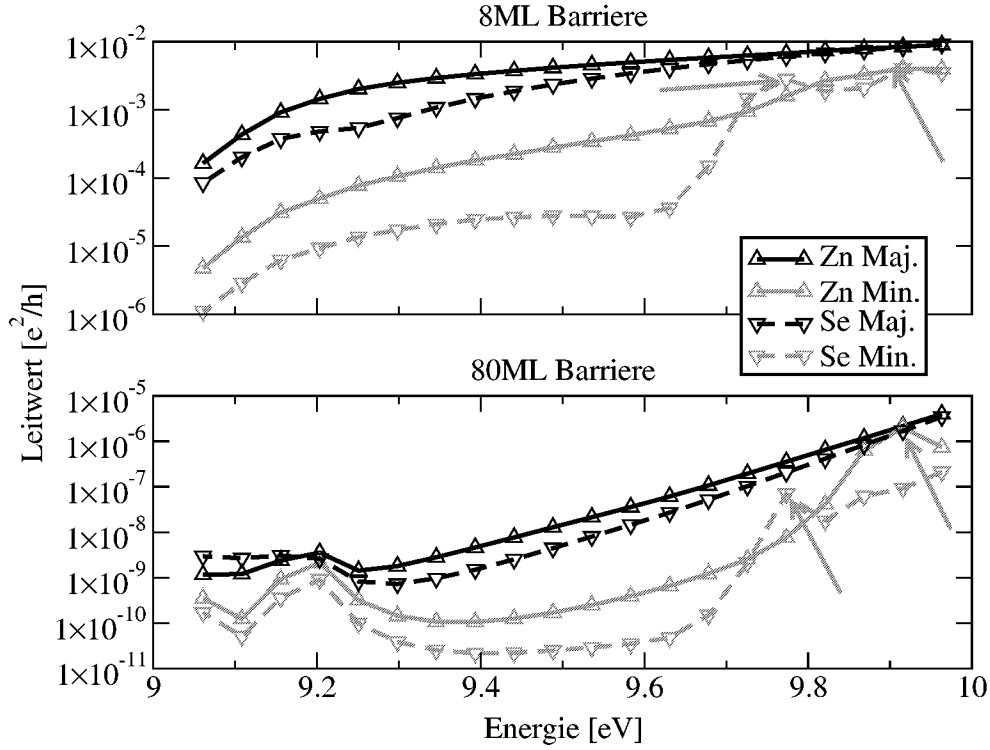


Abbildung 6.26: Leitwert in Fe/ZnSe(001) bei einer angelegten Bias-Spannung von $U = 1\text{V}$ mit einer abrupten Zn (durchgezogene Linien) und einer Se (gestrichelte Linien) Terminierung. Die Dicke der Schottkybarriere beträgt 8 ML (oben) und 80 ML (unten). Der Leitwert der Majoritätselektronen ist schwarz, während der Leitwert der Minoritätselektronen grau dargestellt ist. Die Achse des Leitwerts ist logarithmisch. Die Leitwertmaxima aufgrund des resonanten Grenzflächenzustandes sind durch Pfeile markiert.

Leitwerte bei höheren Energien zwischen 9.8 und 10 eV.

Für den gesamten Leitwert wird über den Energiebereich der angelegten Bias Spannung nach Gleichung (6.23) integriert. In Tabelle 6.4 sind die berechneten Gesamtleitwerte und die sich daraus ergebenden Polarisierungen für die Fe/ZnSe(001) Heterostruktur mit einer 8 und einer 80 ML dicken Tunnelbarriere für beide Terminierungen angegeben.

Die Energie der injizierten Elektronen liegt hier zum Teil sehr hoch im LB. Daher werden Zustände aus der gesamten 2DBZ und nicht nur der kleine Bereich um den $\bar{\Gamma}$ Punkt besetzt. Wie anhand der \mathbf{k}_{\parallel} aufgelöst, heißen Spininjektion (siehe Abschnitt 6.2.1) gezeigt wurde, besitzen Zustände weiter vom $\bar{\Gamma}$ Punkt entfernt nur eine kleine oder sogar negative Spinpolarisation. Daher fällt hier die Polarisierung für beide Terminierungen und einer 8 ML dicken Barriere von über 95% ohne Bias-Spannung (siehe Abbildung 6.18) auf etwa 60% ab. Für eine 80 ML dicke Barriere ergibt sich dagegen bei einer Se terminierten Grenzfläche wieder eine hohe Polarisierung von 87.4%. Hierbei macht sich eine “ $\bar{\Gamma}$ -Filterung” in der Tunnelbarriere bemerkbar. Dieser Filtereffekt wird durch die komplexe Bandstruktur

Terminierung	Barrierendicke (ML)	$G^\uparrow(e^2/h)$	$G^\downarrow(e^2/h)$	P
Zn	8	4.41×10^{-3}	9.81×10^{-4}	63.6%
Se	8	3.37×10^{-3}	8.06×10^{-4}	61.4%
Zn	80	4.40×10^{-7}	1.72×10^{-7}	43.8%
Se	80	3.42×10^{-7}	2.29×10^{-8}	87.4%

Tabelle 6.4: Leitwert und die daraus resultierende Spinpolarisation in Fe/ZnSe(001) bei einer angelegten Bias-Spannung von $U = 1\text{V}$ für eine abrupte Zn und eine Se Terminierung. Die Dicken der Schottkybarrieren betragen 8 und 80 ML.

des HL in der Bandlücke hervorgerufen. Die komplexe Bandstruktur beschreibt das Dämpfungsverhalten der Blochwellen in der Barriere mit Hilfe eines komplexen Wellenvektors $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k} + i\boldsymbol{\kappa}$. Bei den hier betrachteten HL ZnSe und GaAs liegt das absolute Minimum der Dämpfungskonstante $\boldsymbol{\kappa}$ für Zustände in der Mitte der Bandlücke am $\bar{\Gamma}$ Punkt der 2DBZ [86]. Deshalb werden für große Barrierendicken (asymptotischer Bereich) die Blochwellen in der Nähe des $\bar{\Gamma}$ Punkts am wenigsten gedämpft und können die Barriere leichter durchqueren als Zustände mit einem größeren \mathbf{k}_\parallel Vektor. Daher bestimmt der Leitwert am $\bar{\Gamma}$ Punkt für große Barrierendicken den gesamten integrierten Leitwert und somit auch die Polarisation. Da die Spinfilterung am $\bar{\Gamma}$ Punkt aufgrund der Symmetrieunterschiede der Fe Majoritäts- und Minoritätszustände am größten ist, steigt die Polarisation für große Barrierendicken im Falle der Se Terminierung wieder an.

Bei der Zn terminierten Grenzfläche dagegen fällt die Spinpolarisation für die 80 ML dicke Barriere auf 43.8% ab, da sich der resonante Grenzflächenzustand für dickere Barrieren zu höheren Energien verschiebt, wo die effektive Tunnelbarriere kleiner ist (siehe Abbildung 6.25). Der Leitwert durch den Grenzflächenzustand für Minoritätselektronen ist genauso groß wie der Leitwert der Majoritätselektronen (siehe Pfeil in Abbildung 6.26 unten).

Damit ist gezeigt, dass sich auch bei einer hohen Bias-Spannung von 1V noch eine vergleichbar hohe Spinpolarisation im Falle einer Se terminierten Grenzfläche ergibt. Hierfür ist bei dicken Tunnelbarrieren eine $\bar{\Gamma}$ -Filterung verantwortlich, die bewirkt, dass der Leitwert hauptsächlich durch Zustände am $\bar{\Gamma}$ Punkt bestimmt wird, wo die Spinfilterung am größten ist. Auch kann der Einfluss des resonanten Grenzflächenzustands bei beiden Terminierungen, aber besonders stark im Falle der Zn terminierten Grenzfläche, beobachtet werden.

6.3 Fe/Halbleiter(111)

In diesem Abschnitt wird untersucht, ob es eine symmetriebedingte hohe Spinpolarisation auch für Fe/HL Heterostrukturen gibt, die in [111] Richtung gewachsen sind. Die zweidimensionale Einheitszelle von Fe(111) enthält nur ein Fe Atom, obwohl die HL Gitterkonstante doppelt so groß ist. Im HL gibt es ebenfalls pro ML nur ein Atom, also entweder

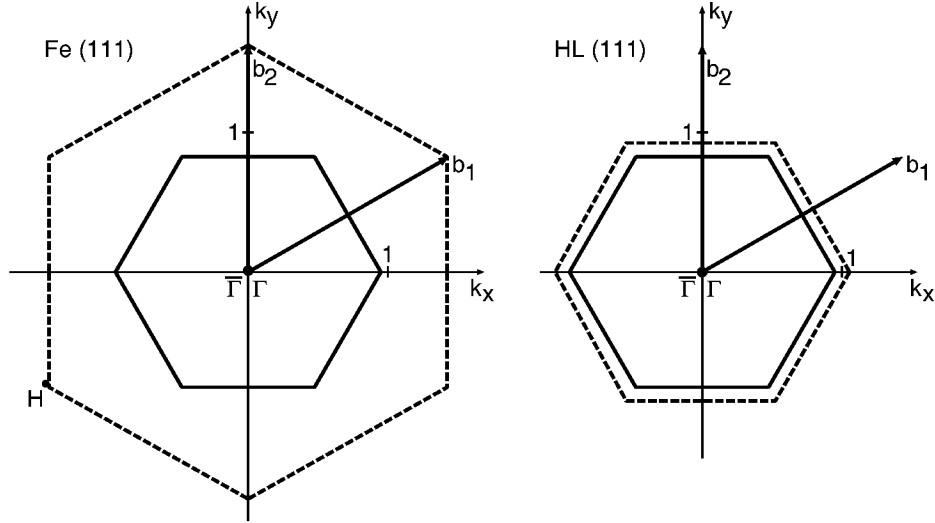


Abbildung 6.27: Zweidimensionale Brillouinzone (BZ) für Fe(111) (links) und HL(111) (rechts). In $[111]$ Richtung sind die zweidimensionalen BZ ausgedehnt im Bereich $k_z = (-2\sqrt{3} \dots 2\sqrt{3}) 2\pi/d_{\text{HL}}$ für Fe(111) und von $k_z = (-1/2\sqrt{3} \dots 1/2\sqrt{3}) 2\pi/d_{\text{HL}}$ für HL(111). Die reziproken Vektoren sind in Einheiten von $2\pi/d_{\text{HL}}$ angegeben. Gestrichelte Linien stellen einen (111) Schnitt durch die jeweilige Bulk BZ dar.

ein Anion, Kation oder eine der beiden, nicht identischen Leerstellen. Im Folgenden wird nur eine Zn terminierte Fe/ZnSe(111) Grenzfläche untersucht. Alle Symmetrieargumente gelten allerdings genauso für die Se terminierte Grenzfläche wie für die Fe/GaAs(111) Heterostruktur. In (111) Orientierung gibt es zwei unterschiedliche Zn Terminierungen, die durch die verschiedenen Stapelfolgen in $[111]$ Richtung entstehen: bei der einen ist das Zn Atom an der Grenzfläche mit einem Fe Atom (...Fe-Zn-Leerstelle2-Leerstelle1-Se...) und bei der anderen mit drei Fe Atomen (...Fe-Zn-Se-Leerstelle1-Leerstelle2...) koordiniert. Wie bei der (001) Orientierung besitzt die $[111]$ Richtung unterschiedliche Symmetrien im Bulk Fe und Bulk HL. Im Fe hat die $[111]$ Richtung eine sechsfache und im HL nur eine dreifache Drehachse.

Brillouinzone und Bandstrukturen

Als erstes wird der $\bar{\Gamma}$ Punkt in der 2DBZ des Fe Halbraumes diskutiert. Die 2DBZ ist in Abbildung 6.27 links dargestellt. Hierbei liegen k_x , k_y und k_z nicht mehr entlang der kubischen Achsen von bcc-Fe, sondern sind auf die zweidimensionale Geometrie angepasst. Dabei zeigt k_z in $[111]$ Richtung und k_x , k_y liegen in der (111) Ebene. Diese 2DBZ ist identisch mit der einer freien Fe(111) Oberfläche, da sich hier nur ein Fe Atom in der zweidimensionalen Einheitszelle befindet. Im Vergleich zum Nächsten-Nachbar Abstand im Bulk Fe von $\sqrt{3}/4 d_{\text{HL}} \approx 0.43 d_{\text{HL}}$ ist der Abstand der Fe Atome innerhalb der (111) Ebene mit $\sqrt{1/2} d_{\text{HL}} \approx 0.71 d_{\text{HL}}$ relativ groß. Dafür sind die Monolagen sehr dicht übereinander

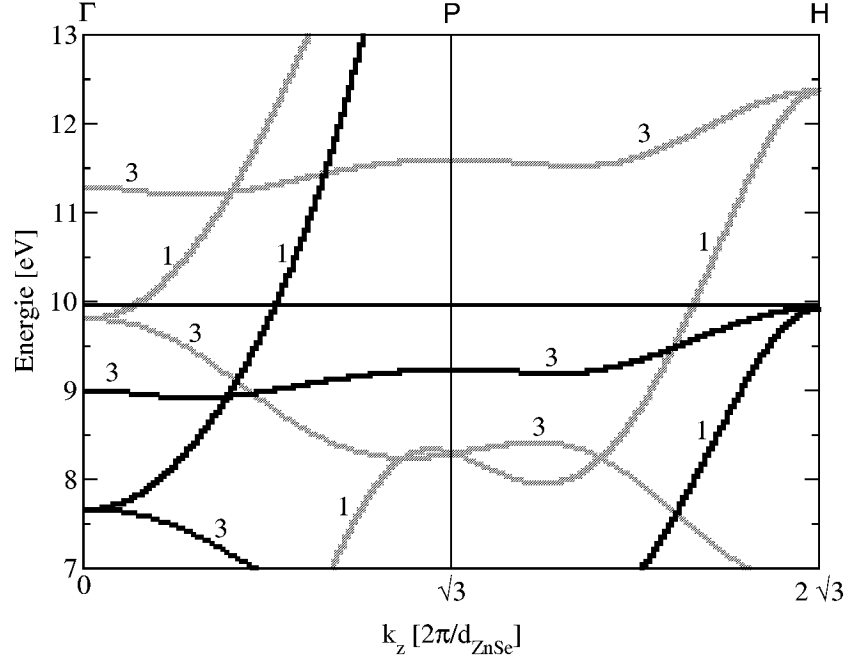


Abbildung 6.28: Bandstruktur von Fe(111) am $\bar{\Gamma}$ Punkt in [111] Richtung. Schwarze Linien stellen Majoritäts- und graue Minoritätszustände dar. Die Zahlen geben zwischen Γ -P die Λ und zwischen P-H die F Symmetrien der Bänder in der Bulk Brillouinzone von Fe an [124]. Die Fermienergie ist durch eine horizontale Linie angedeutet.

gestapelt mit einem Monolagenabstand von $\sqrt{1/48} d_{\text{HL}} \approx 0.14 d_{\text{HL}}$. Daher ist die 2DBZ verglichen mit der Bulk Fe BZ sehr klein, aber überragt mit einer Ausdehnung von $k_z = (-2\sqrt{3} \dots 2\sqrt{3}) 2\pi/d_{\text{HL}}$ die Bulk BZ in [111] Richtung.

Das nicht zurückgefaltete Band am $\bar{\Gamma}$ Punkt entspricht dem Bulk Band entlang der Hochsymmetrierichtung Γ -P-H, d.h. es geht über die erste BZ in [111] Richtung bis zum P Punkt hinaus. Diese Bänder haben entlang Γ -P eine Λ und entlang P-H eine F Symmetrie. Aufgrund der kleinen Ausdehnung der 2DBZ in der Ebene wird ein weiteres Band zurückgefaltet. Werden die beiden reziproken Gittervektors \mathbf{b}_1 oder \mathbf{b}_2 angewendet, wird aufgrund der großen Ausdehnung in k_z Richtung insgesamt ein Band zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet, das ebenso dem Bulk Band entlang der Γ -P-H Richtung entspricht. Damit sind die Fe Bänder am $\bar{\Gamma}$ Punkt durch Rückfaltung zweifach entartet.

Die Bandstruktur von Fe(111) am $\bar{\Gamma}$ Punkt in k_z Richtung ist in Abbildung 6.28 dargestellt. In der Bandstruktur von Fe(111) wird bereits ein grundlegender und wichtiger Unterschied zur Fe(001) Bandstruktur erkennbar. Durch das Vorhandensein eines Λ_1 Bandes sowohl im Majoritäts- als auch im Minoritätsband an der Fermienergie, das aus Symmetriegründen an das LB im HL koppeln kann, kann es keine symmetriebedingte hohe Spinpolarisation geben. Der Grund hierfür ist, dass in [111] Richtung die Fermienergie im Minoritätsband oberhalb der s - d Hybridisierungslücke liegt und nicht innerhalb dieser

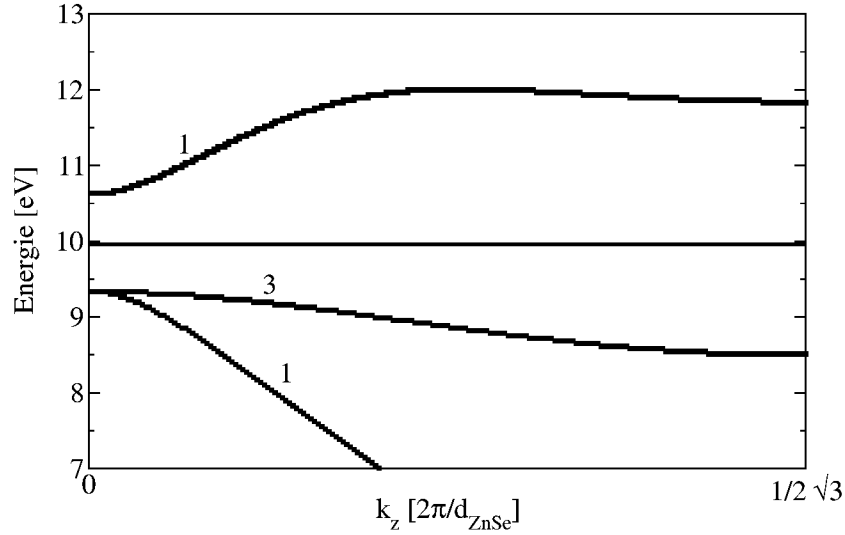


Abbildung 6.29: Bandstruktur von ZnSe(111) am $\bar{\Gamma}$ Punkt in $[111]$ Richtung. Die Zahlen geben die Λ Symmetrien der Bänder in der Bulk ZnSe Brillouinzone an [125]. Die Fermienergie ist in der Mitte der Bandlücke angenommen worden.

Lücke wie für die $[001]$ Richtung. In der $[111]$ Richtung gibt es nur eine kleinere s - d Hybridisierung als in der $[001]$ Richtung und somit ist auch die s - d Hybridisierungslücke mit etwa 1.5eV kleiner als in der $[001]$ Richtung mit etwa 4.5eV.

Die 2DBZ des HL Halbraums ist auf der rechten Seite in Abbildung 6.27 dargestellt. Das Band am $\bar{\Gamma}$ Punkt entspricht dem Band in der Bulk BZ entlang der Hochsymmetrierrichtung Γ -L, deren Symmetrie mit Λ bezeichnet wird. Wegen der größeren Gitterkonstante im Vergleich zum Fe werden keine weiteren Bänder zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet. Die Bandstruktur am $\bar{\Gamma}$ Punkt ist in Abbildung 6.29 gezeigt. Oberhalb von 12.0eV steht im HL kein Band am $\bar{\Gamma}$ Punkt zur Verfügung (in dem hier gezeigten Energiebereich).

Leitwert

In Abbildung 6.30 ist die heiße Spininjektion in Fe/ZnSe(111) mit den beiden möglichen Zn Terminierungen dargestellt. Hier wird wiederum der Einfachheit halber nur der $\bar{\Gamma}$ Punkt betrachtet. Die berechneten Leitwerte belegen die obige Vermutung, dass es keine symmetriebedingte hohe Spinpolarisation für diese Orientierung gibt. Vielmehr zeigen beide Terminierungen nur eine kleine Spinpolarisation, die von den unterschiedlich starken Kopplungen der Fe Majoritäts- und Minoritätszustände an das LB herrühren. Die Spinpolarisation und sogar das Vorzeichen hängen sehr von der Terminierung und auch von der Energie ab. Dagegen ist eine symmetriebedingte hohe Spininjektion wie in (001) orientierten Heterostrukturen relativ unabhängig von der Terminierung und der Energie. Das Minimum des Leitwertes bei 11.8eV kommt von der verschwindenden Gruppengeschwindigkeit des LB am Rand der BZ. Oberhalb von 12.0eV existieren am $\bar{\Gamma}$ Punkt keine Zustände im

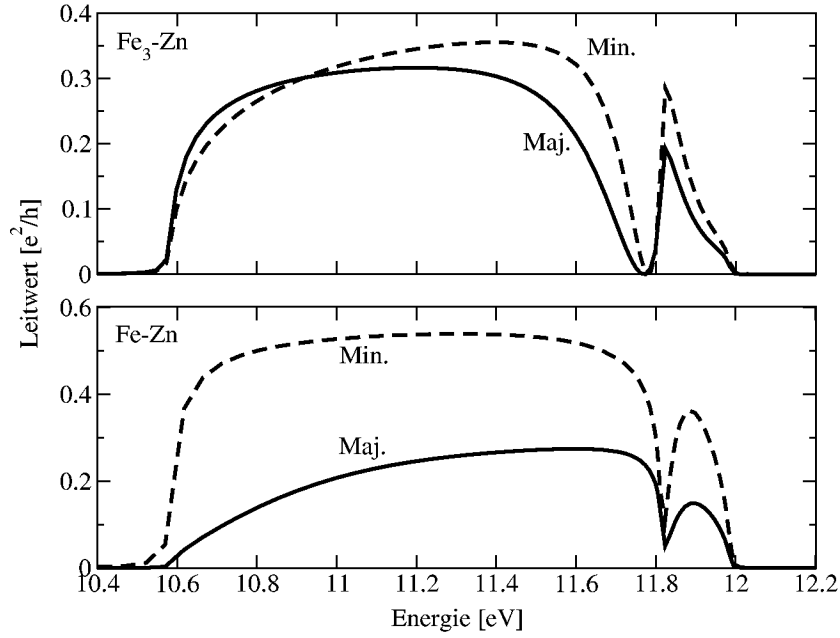


Abbildung 6.30: Heiße Spininjektion am $\bar{\Gamma}$ Punkt in Fe/ZnSe(111) für eine dreifach koordinierte (oben) und eine einfach koordinierte Grenzfläche (unten). Durchgezogene Linien stellen den Leitwert der Majoritäts- und gestrichelte Linien den der Minoritätselektronen dar.

ZnSe(111) und somit keine Stromkanäle mehr.

Hier wird kurz die Spinpolarisation von thermischen Elektronen in Fe/ZnSe(111) mit Fermienergien von einigen 10meV oberhalb des LBM vorgestellt. Für die einfach koordinierte Zn Grenzfläche ergibt sich eine Polarisation von etwa -60% und für die dreifach koordinierte etwa +80% für Fermienergien einige 10meV oberhalb des LBM. Somit zeigt auch die thermische Spininjektion keine hohe Spinpolarisation aufgrund des fehlenden Symmetrieunterschiedes.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass (111) orientierte Heterostrukturen für die Spininjektion nicht geeignet sind, da in dieser Richtung am $\bar{\Gamma}$ Punkt kein Symmetrieunterschied zwischen den Fe Majoritäts- und Minoritätszuständen vorhanden ist. Daher ergeben sich nur Polarisationen, die von der Terminierung der Grenzfläche und auch von der Energie abhängen.

6.4 Fe/Halbleiter(110)

In diesem Abschnitt wird die ballistische Spininjektion in Fe/HL für die (110) Orientierung untersucht. Eine in [110] Richtung orientierte Grenzfläche kann beispielsweise mit einem

Stromtransport in der Ebene¹¹ (CIP) in (001) orientierten Schichten erhalten werden. Die Grenzfläche zwischen den Fe und den HL Strukturen muss in der Ebene liegen und durch gerichtetes Ätzen entlang der (110) Richtung hergestellt werden [130]. Die (110) Richtung ist von den hier untersuchten Orientierungen die mit der geringsten Symmetrie, wodurch eine symmetriebedingte hohe Spinpolarisation unwahrscheinlich wird.

In der (110) Orientierung besteht die zweidimensionale Einheitszelle im Fe aus 4 nicht identischen Fe Atomen. Ihre Basisvektoren sind: $\mathbf{R}_1 = 0$,

$$\mathbf{R}_2 = \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/\sqrt{8} \\ 0 \end{pmatrix} d_{\text{HL}}, \quad \mathbf{R}_3 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} d_{\text{HL}}, \quad \mathbf{R}_4 = \begin{pmatrix} 3/4 \\ 1/\sqrt{8} \\ 0 \end{pmatrix} d_{\text{HL}}. \quad (6.24)$$

Die 2DBZ von Fe(110) ist im Vergleich zur Bulk BZ sehr klein, so dass mehrere Bänder zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet werden. Im HL Halbraum befinden sich ebenfalls die beiden unterschiedlichen Atome (Kation und Anion) sowie die beiden nicht-identischen Leerstellen in jeder ML. Daher ist auch im HL die 2DBZ im Vergleich zu der Bulk BZ sehr klein und wie weiter unten gezeigt wird, werden auch im HL(110) Bänder zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet. Da alle vier nicht-identischen Atome der HL Einheitszelle in jeder ML liegen, existiert in dieser Orientierung nur eine mögliche Terminierung.

Brillouinzonen und Bandstrukturen

Zunächst wird der $\bar{\Gamma}$ Punkt in der 2DBZ von Fe(110) diskutiert (siehe Abbildung 6.31 links). Dabei liegen k_x , k_y und k_z nicht entlang der kubischen Richtungen, sondern k_z zeigt in [110] Richtung und k_x und k_y liegen in der (110) Ebene. Das nicht zurückgefaltete Band am $\bar{\Gamma}$ Punkt entspricht dem Band in der Bulk BZ zwischen Γ -N, d.h. entlang der Σ Hochsymmetrierichtung.

Bei einer einmaligen Anwendung des reziproken Gittervektors \mathbf{b}_2 wird ein zusätzliches Band zurückgefaltet, das dem Band in der Bulk BZ zwischen N-H, d.h. der G-Hochsymmetrierichtung entspricht. Die Phasenunterschiede an den vier unterschiedlichen Fe Positionen in der zweidimensionalen Einheitszelle sind für dieses zurückgefaltene Band (siehe Basisvektoren (6.24))

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{R}_2} &= -1 \\ e^{i\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{R}_3} &= +1 \\ e^{i\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{R}_4} &= -1. \end{aligned}$$

Bei der einmaligen Anwendung von \mathbf{b}_1 wird ein Band zum $\bar{\Gamma}$ zurückgefaltet, dass in der Bulk BZ nicht auf einer Hochsymmetrierichtung liegt. Das Band liegt zwischen den reziproken Punkten in der Bulk BZ

$$\begin{pmatrix} -1/4 \\ -1/4 \\ 1/2 \end{pmatrix} \frac{2\pi}{d_{\text{Fe}}} \rightarrow \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/2 \end{pmatrix} \frac{2\pi}{d_{\text{Fe}}}, \quad (6.25)$$

¹¹Englisch: *Current In Plane*

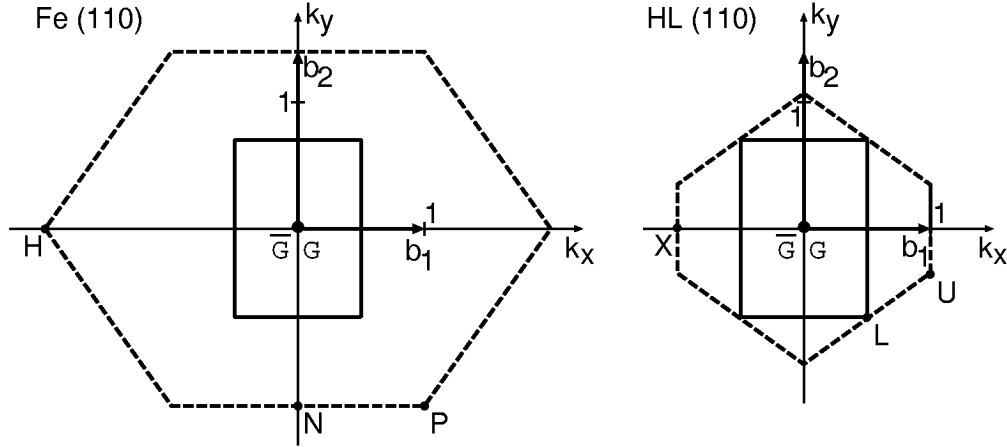


Abbildung 6.31: Zweidimensionale Brillouinzone (BZ) (durchgezogene Linien) für Fe(110) (links) und HL(110) (rechts). In [110] Richtung sind die zweidimensionalen BZ ausgedehnt im Bereich von $k_z = (-1/\sqrt{2} \dots 1/\sqrt{2}) 2\pi/d_{\text{HL}}$ für Fe(110) und von $k_z = (-\sqrt{2} \dots \sqrt{2}) 2\pi/d_{\text{HL}}$ für HL(110). Die reziproken Vektoren sind in Einheiten von $2\pi/d_{\text{HL}}$ angegeben. Gestrichelte Linien stellen einen (110) Schnitt durch die jeweilige Bulk BZ dar.

wobei hier die Koordinatenachsen mit den kubischen Richtungen von Bulk Fe übereinstimmen, um das entsprechende Band in der Bulk BZ berechnen und identifizieren zu können. Bei diesem Band haben die vier Fe Basisatome folgende Phasenunterschiede

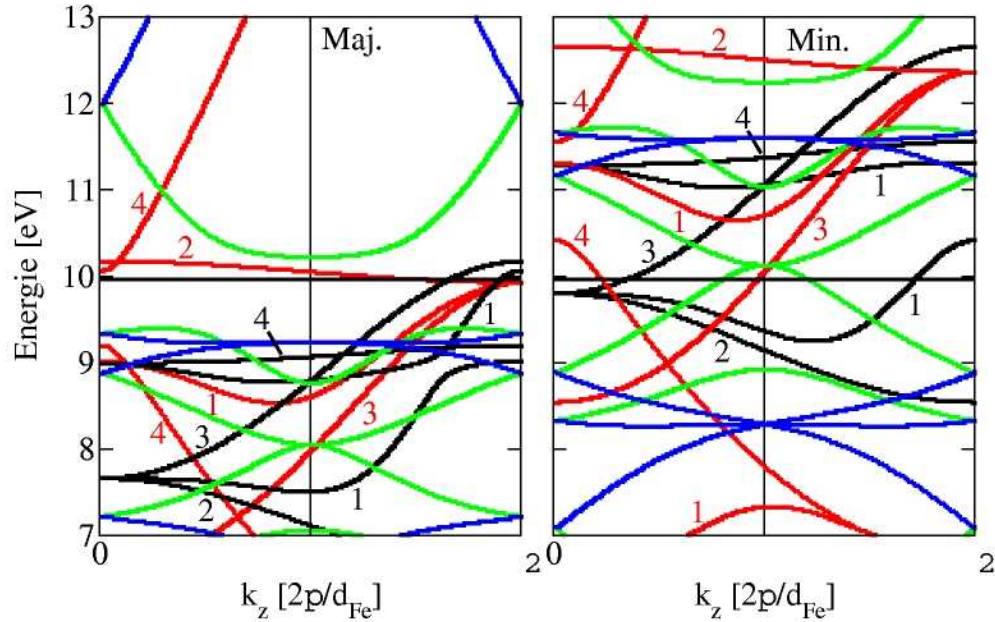
$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{R}_2} &= e^{i\pi/2} = +i \\ e^{i\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{R}_3} &= e^{i\pi} = -1 \\ e^{i\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{R}_4} &= e^{i3\pi/2} = -i. \end{aligned}$$

Werden die beiden reziproken Gittervektoren \mathbf{b}_1 und \mathbf{b}_2 angewendet, so wird ein weiteres Band zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet, das in der Bulk BZ ebenfalls nicht entlang einer Hochsymmetrierichtung liegt. Es ist gegenüber dem vorherigen Band (Gleichung (6.25)) in [110] Richtung verschoben. In der Bulk BZ von Fe liegt dieses Band zwischen den reziproken Punkten

$$\begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/2 \end{pmatrix} \frac{2\pi}{d_{\text{Fe}}} \rightarrow \begin{pmatrix} 3/4 \\ 3/4 \\ 1/2 \end{pmatrix} \frac{2\pi}{d_{\text{Fe}}}. \quad (6.26)$$

Bei diesem Band ergeben sich Phasenunterschiede wie beim vorherigen zurückgefalteten Band (Gleichung (6.25)) nur um eine Phase von π verschoben.

Die sich so ergebende Bandstruktur ist in Abbildung 6.32 dargestellt. Dabei werden die vier Bänder durch unterschiedliche Farben dargestellt. Für die Spininjektion sind besonders die Bänder an der Fermienergie wichtig. In diesem Fall stehen für Majoritäts- und Minoritätselektronen mehrere Bänder zur Verfügung. Bei dem nicht zurückgefaltenen Band (schwarze Linien) steht sowohl im Majoritätsband wie auch im Minoritätsband ein Σ_1 und



Abbildungung 6.32: Bandstruktur von Fe(110) am $\bar{\Gamma}$ Punkt in $[110]$ Richtung. Links sind die Bänder der Majoritäts- und rechts die der Minoritätselektronen dargestellt. Die Farben der Linien zeigt den Ursprung der Bänder in der Brillouinzone von Bulk Fe: schwarz: Γ -N, rot: N-H, grün: \mathbf{b}_1 und blau: $\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$ (siehe Text). Die Fermienergie ist mit einer horizontalen Linie angedeutet. Die Zahlen geben, sofern vorhanden, die entsprechende Symmetrie des Bandes in der Brillouinzone von Bulk Fe an [124].

ein Σ_3 Band zur Verfügung. Zusammen mit den anderen zurückgefalteten Bänder wird deutlich, dass eine symmetriebedingte Spinpolarisation in der (110) Orientierung nicht vorhanden ist.

Im Folgenden wird die 2DBZ vom HL(110) diskutiert. Da im HL(110) Halbraum alle vier unterschiedlichen Atome in jeder ML vorhanden sind, ist die 2DBZ (siehe Abbildung 6.31 rechts) so klein, dass auch im HL weitere Bänder zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet werden. Das nicht zurückgefaltete Band am $\bar{\Gamma}$ Punkt entspricht dem Band in der Bulk BZ entlang der Γ -K Richtung (Σ Richtung), geht aber über die Bulk BZ in $[110]$ Richtung hinaus. Bei der Anwendung des reziproken Gittervektors \mathbf{b}_1 wird ein Band zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet, das auch dem Fe Band in der Bulk BZ entlang der Σ Richtung entspricht. Daher ist das LB zweifach entartet. Das bedeutet, dass der maximale Leitwert $2e^2/h$ pro Spinrichtung beträgt. Die Bandstruktur von ZnSe(110) ist in Abbildung 6.33 wiedergegeben.

Zusammengefasst werden im Fe und sogar im HL Halbraum aufgrund der kleinen 2DBZ mehrere Bänder zum $\bar{\Gamma}$ Punkt zurückgefaltet, von denen zwei im Fe(110) nicht entlang einer Bulk Hochsymmetrierichtung liegen. Das bedeutet, dass nur eine Symmetrieoperation, nämlich die Einheitsoperation, sie ineinander überführen und somit eine Symmetriediskussion schwierig und eine symmetriebedingte hohe Spinpolarisation nicht vorhanden ist.

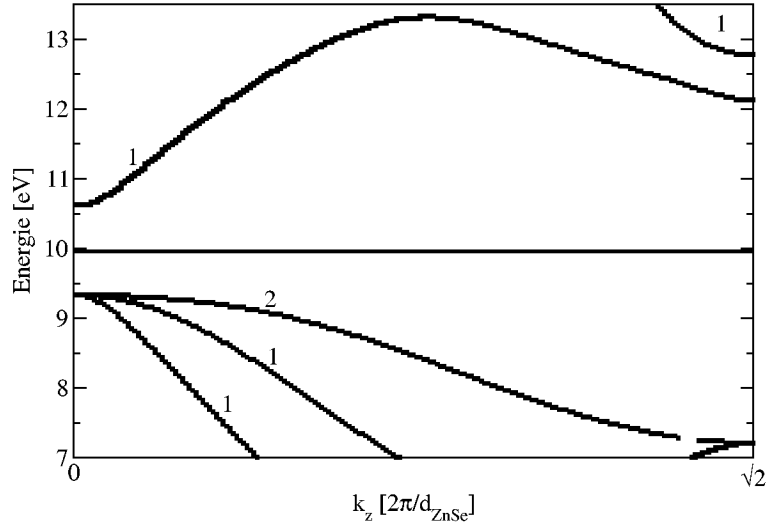


Abbildung 6.33: Bandstruktur von ZnSe(110) am $\bar{\Gamma}$ Punkt in [110] Richtung. Die Zahlen geben die Σ Symmetrie der Bänder in der Bulk BZ von ZnSe an [125]. Die Fermienergie ist in der Mitte der Bandlücke angenommen worden.

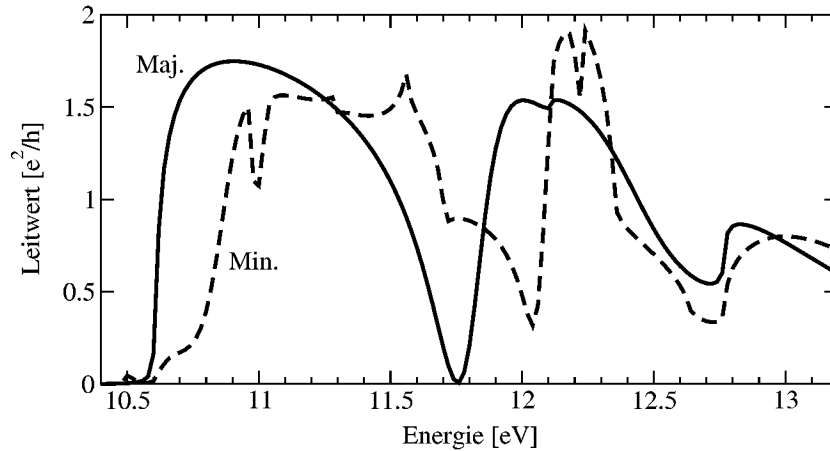


Abbildung 6.34: Heiße Spininjektion am $\bar{\Gamma}$ Punkt in Fe/ZnSe(110). Die durchgezogene Linie zeigt den Leitwert der Majoritäts- und die gestrichelte Linie die der Minoritätselektronen.

Leitwert

Der berechnete Leitwert bei der heißen Spininjektion am $\bar{\Gamma}$ Punkt ist in Abbildung 6.34 dargestellt. Der Leitwert ist stark energieabhängig, da in diesem Energiebereich viele verschiedene Fe Bänder am $\bar{\Gamma}$ Punkt vorhanden sind. Die hohen Leitwerte von über $1e^2/h$ pro Spinrichtung im Vergleich zu den beiden anderen Orientierungen kommen von der zweifachen Entartung des LB im HL aufgrund der Rückfaltung zum $\bar{\Gamma}$ Punkt. Eine symme-

triebedingte hohe Spinpolarisation ist nicht vorhanden. Am Leitungsbandminimum (LBM) steigt die Spinpolarisation auf 80% an und fällt 0.2eV oberhalb des LBM wieder ab. An den höheren Energien in Abbildung 6.34 nimmt die Polarisation Werte zwischen -100% und +60% an. Bei der Injektion von thermischen Elektronen wird für eine Fermienergie von 10meV oberhalb des LBM eine Spinpolarisation von -80% berechnet. Diese steigt für Fermienergien bis 100meV im LB langsam auf etwa -60% an.

Damit kann zusammengefasst werden, dass in der (110) Orientierung sowohl bei der heißen als auch bei der thermischen Spininjektion in bestimmten Energiebereichen eine hohe Spinpolarisation gefunden wird, diese aber nicht aufgrund von Symmetrieunterschieden im Majoritäts- und Minoritätsband hervorgerufen wird. Es ist vielmehr eine Polarisation wie bei der (111) Orientierung, die von unterschiedlichen Kopplungsstärken der Fe Zustände an das LB von ZnSe stammen. Daher gibt es für (110) orientierte Heterostrukturen ebenfalls keine symmetriebedingte hohe Spinpolarisation.

6.5 Zusammenfassung und Diskussion

In diesem Kapitel wurde die ballistische Spininjektion von Fe in die nichtmagnetischen Halbleiter (HL) ZnSe und GaAs untersucht. Dabei wurden die (001), (111) und (110) Wachstumsorientierungen mit drei unterschiedlichen Injektionsprozessen diskutiert: die Injektion von heißen Elektronen und von thermischen Elektronen sowohl direkt als auch durch eine Schottkybarriere in das Leitungsband des HL. Es konnte gezeigt werden, dass in der (001) orientierten Heterostruktur die Fe/HL Grenzfläche wie ein nahezu 100% Spinfilter wirkt. Die Ursache wurde zurückgeführt auf die unterschiedlichen Symmetrien der Fe Zustände für Majoritäts- und Minoritätselektronen. Im Fe Majoritätsband existiert ein Δ_1 Zustand, der aus delokalisierten s und p_z Orbitalen aufgebaut ist und in die Richtung des HL zeigt. Dieses Band kann daher gut an das Δ_1 Leitungsband im HL ankoppeln. Im Minoritätsband liegt die Fermienergie in der s - d Hybridisierungslücke, weshalb dort kein Δ_1 Zustand vorhanden ist. Es gibt nur ein $\Delta_{2'}$ Band, das aus Symmetriegründen an das Leitungsband ankoppeln darf. Da dieses aus stärker lokalisierten und in der xy Ebene senkrecht zur Wachstumsrichtung liegenden d_{xy} Orbitalen aufgebaut ist, koppelt es schwächer an das Leitungsband als das Δ_1 Majoritätsband. Es wurde gezeigt, dass daher der Leitwert der Majoritätselektronen um mehrere Größenordnungen höher als im Minoritätsband ist. Somit ergibt sich eine Spinpolarisation von praktisch 100%. Dieser Effekt wurde "symmetriebedingte hohe Spinpolarisation" genannt. Für die beiden anderen untersuchten Orientierungen, die (111) und (110) Orientierung, wurde kein solcher Symmetrieunterschied gefunden. Es wurden nur Spinpolarisationen aufgrund unterschiedlich starker Kopplungen der Fe Majoritäts- und Minoritätszustände an das Leitungsband erhalten. So konnte gezeigt werden, dass die Symmetrie der Wellenfunktion beim ballistischen Stromtransport sehr wichtig ist und in (001) orientierten Fe/HL Strukturen für die sehr hohe Spinpolarisation verantwortlich ist.

Neben dem Injektionsprozess von heißen Elektronen oberhalb der Fermienergie zum Nachweis des Symmetrieeffektes, wurde auch die thermische Spininjektion mit und ohne

Schottkybarriere an der Grenzfläche untersucht. Bei der thermischen Spininjektion ohne Schottkybarriere wurde in Fe/ZnSe(001) und in Fe/GaAs(001) in allen Terminierungen eine Spinpolarisation von nahezu 100% gefunden. Wird eine Schottkybarriere an der Fe/HL(001) Grenzfläche eingefügt, so ergab sich ebenfalls eine sehr hohe Spinpolarisation in Fe/GaAs(001) und in der Se terminierten Grenzfläche von Fe/ZnSe(001). Allerdings trat bei der Zn Terminierung ein weiterer wichtiger Effekt auf: ein resonanter Grenzflächenzustand mit einer Δ_1 Symmetrie im Minoritätsband bestimmt den Strom durch die Tunnelbarriere und kann sogar, wenn er sehr nahe an der Fermienergie liegt, zu einer negativen Spinpolarisation führen. Bei einer freien Fe(001) Oberfläche ist dieser Δ_1 Zustand an der Grenzfläche lokalisiert, da er an kein Fe Minoritätsband koppeln kann. Bei der Fe/HL(001) Grenzfläche hingegen kann er aufgrund der reduzierten C_{2v} Symmetrie an das Fe Δ_2' Band ankoppeln und zum Stromtransport beitragen. Es konnte durch monolagenaufgelöste Zustandsdichten gezeigt werden, dass der Grenzflächenzustand durch Wechselwirkung mit dem HL LB energetisch verschoben wird.

Um diese hohe Spinpolarisationen zu erhalten, ist eine ideale Grenzfläche eine wesentliche Voraussetzung. Es konnte in der Literatur sowohl theoretisch [117] wie experimentell [131] gezeigt werden, dass eine nicht-ideale Grenzfläche, z.B. Grenzflächendiffusion, Kristallfehler an der Grenzfläche etc., die Spinpolarisation stark reduziert. Ist die zweidimensionale Translationssymmetrie an der Grenzfläche nicht mehr gegeben, so ist die hier vorausgesetzte Erhaltung der Komponente des reziproken Vektors in der Grenzflächenebene \mathbf{k}_{\parallel} beim Überqueren nicht mehr erfüllt. Stattdessen können Fe Zustände aus der gesamten zweidimensionalen Brillouinzone in das Leitungsband am $\bar{\Gamma}$ Punkt, d.h. bei $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$, streuen. Weiter gelten bei einer Grenzflächenrauhigkeit nicht mehr die hier diskutierten Symmetrien exakt, so dass weitere Fe Minoritätsbänder an das Leitungsband ankoppeln können, die bei einer idealen Grenzfläche aus Symmetriegründen verboten sind (z.B. die Fe Minoritätsbänder Δ_2 und Δ_5).

In dem ersten erfolgreichen Experiment zur Spininjektion von Fe(001) in GaAs durch eine Schottkybarriere der Ploog Gruppe [36] wurde eine Spinpolarisation von 2% gemessen. In weiteren Untersuchungen [111] wurde nachgewiesen, dass die Spinpolarisation negativ ist, d.h. eine Injektion von Minoritätselektronen vorliegt. Dies steht im Gegensatz zu den hier gezeigten Ergebnissen einer Injektion von Majoritätselektronen. Dieser Widerspruch konnte bislang noch nicht befriedigend erklärt werden.

Neuere Experimente in Fe/GaAs(001) mit einer Schottkybarriere der Jonker Gruppe ergaben allerdings eine positive¹² und auch höhere Polarisation von 13% [102] und in diesem Jahr sogar von 32% [37]. Somit belegt das Vorzeichen und auch die Höhe der gemessenen Spinpolarisationen die Ergebnisse dieser Arbeit, dass bei einer Spininjektion durch eine ballistische Schottkybarriere in Fe/GaAs(001) eine sehr hohe Spinpolarisation erhalten werden kann.

In unserer Arbeitsgruppe wurden auch Berechnungen durchgeführt, bei denen ein spinpolarisierter Strom von einer Fe(001) Elektrode in das Leitungsband von GaAs oder ZnSe

¹²In den Experimenten [37, 102] wurde für alle gemessenen Bias-Spannungen eine Injektion von Majoritätselektronen gefunden. In Ref. [102] wird irrtümlicherweise von Minoritätselektronen berichtet [132].

injiziert und nach einer bestimmten Halbleiterdicke mit einer zweiten Fe(001) Elektrode detektiert wurde [118]. Dabei wurden Fabry-Perot ähnliche Resonanzen in den Leitwerten gefunden, die durch Mehrfachreflexionen der Blochwellen in der HL Schicht hervorgerufen werden.

Kapitel 7

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden zwei Aspekte des spinabhängigen ballistischen Transports untersucht. Beide Gebiete gehören zu einer neuen Form der Mikroelektronik, der Magneto- bzw. der Spinelektronik. Darin wird die Ladung und der Spin des Elektrons miteinander kombiniert, um so eine leistungsfähigere Elektronik herstellen zu können. Im ersten Teil wurde ein Phänomen diskutiert, das im Leitwert von *ab initio* Rechnungen zum Tunnelmagnetowiderstand (TMR) gefunden, aber bislang in der Literatur nicht vollständig verstanden wurde. In dieser Arbeit konnte dieses anhand eines einfachen, analytischen Modells und detaillierten *ab initio* Rechnungen beschrieben und erklärt werden. Im zweiten Teil wurde eine der grundlegenden Voraussetzungen der Spinelektronik untersucht: die Erzeugung eines spinpolarisierten Stromes in einem Halbleiter. Es wurden *ab initio* Rechnungen für die Spininjektion von Fe in ZnSe und GaAs im ballistischen Transportregime durchgeführt. Die bislang veröffentlichten analytischen Modelle erhielten eine Spinpolarisation im Halbleiter von etwa 10 Prozent. In dieser Arbeit konnte dagegen zum ersten Mal gezeigt werden, dass dies mit einer nahezu 100 prozentigen Spinausrichtung möglich ist, falls die Grenzfläche defektfrei ist.

In Kapitel 5 wurden die **Hot Spots** aus *ab initio* Rechnungen von Tunnelmagnetowiderständen diskutiert. Um die Eigenschaften der Hot Spots auf eine möglichst transparente Weise zu untersuchen, wurde ein einfaches, analytisches Modell entworfen. Dieses Modell beschreibt die Tunnelbarriere durch eine konstante Potentialbarriere und die Elektroden durch ein in Stromrichtung konstantes Potential mit einer Potentialoszillation senkrecht dazu. Weiter wurden an den Grenzflächen Zustände durch anziehende δ -förmige Potentiale realisiert. Mit diesem einfachen Modell gelang es in dieser Arbeit, die Hot Spots qualitativ sehr gut zu simulieren und ihre Eigenschaften zu untersuchen.

Das Modell ergibt für den Fall, dass keine Zustände an den Grenzflächen vorhanden sind, das bekannte Tunnelverhalten von Elektronen durch eine Barriere. Dieser Fall entspricht der Transmission von Majoritätselektronen in *ab initio* Rechnungen von TMR Strukturen.

Bei einem Grenzflächenzustand auf einer Seite der Barriere wird ein Maximum in der Transmission erzeugt, das durch eine verstärkte Amplitude der Wellenfunktion an der entsprechenden Grenzfläche hervorgerufen wird. Damit konnten aber noch nicht die Hot Spots

mit einer vollständigen Transmission durch die Barriere erklärt werden. Dieses Transmissionsmaximum entspricht vielmehr den Maxima, die in *ab initio* Rechnungen des Leitwerts für die antiparallele Konfiguration der magnetischen Momente der beiden ferromagnetischen Elektroden gefunden wurden.

Werden zwei identische Grenzflächenzustände erzeugt, ergeben sich zwei Maxima mit einer vollständigen Transmission. Diese Maxima entsprechen den in *ab initio* Rechnungen im Minoritätsband gefundenen Hot Spots. Es wurde gezeigt, dass die Durchquerung der Barriere ohne Intensitätsverlust in diesen Maxima durch eine Hybridisierung der beiden Grenzflächenzustände in bindende und antibindende Zustände hervorgerufen wird. Der bindende Zustand besitzt eine nahezu symmetrische Wellenfunktion und der antibindende eine nahezu antisymmetrische. Diese fast perfekte Symmetrie legt bereits nahe, dass die Transmission durch die Barriere nahezu eins sein muss. Sehr anschaulich konnte die vollständige Transmission in einem zeitabhängigen Bild erklärt werden. Dabei hüpfen die Elektronen in den Hybriden kohärent zwischen den Grenzflächen hin und her. So gelangen sie auf die andere Barrierenseite, ohne dass sie durch die Barriere tunneln müssen. Daher nennen wir diesen Effekt auch "vollständige Transmission durch resonantes Hüpfen". Wird die Barrierendicke vergrößert, so verringert sich die Aufspaltung der beiden Resonanzen durch den geringeren Überlapp der Wellenfunktionen in der Barriere. Dabei stellte sich heraus, dass die vollständige Transmission solange erhalten bleibt, wie die beiden Resonanzen aufgespalten sind. Sobald sie miteinander verschmolzen sind, fällt die maximale Transmission in der Resonanz drastisch ab. Auch dieser Effekt konnte im zeitabhängigen Bild erklärt werden: Ist die Lebensdauer der Elektronen in den Grenzflächenresonanzen kleiner als die Hüpfzeit von einer Grenzfläche zur anderen, so können die symmetrischen und antisymmetrischen Hybridzustände nicht mehr ausgebildet werden, und die Transmission ist nicht mehr vollständig. Da die Lebensdauer durch das Inverse der Resonanzlinienbreite und die Hüpfzeit durch das Inverse der Aufspaltung des bindenden und antibindenden Hybrids bestimmt wird, konnte damit das Verhalten für größere Barrierendicken erklärt werden. Durch eine Diskussion der Transmission als Funktion der symmetrischen und antisymmetrischen Streuphasen wurde in dieser Arbeit gezeigt, dass es eine kritische Barrierendicke gibt, bis zu der die maximale Transmission exakt eins ist.

Die Ergebnisse des in dieser Arbeit vorgeschlagenen analytischen Modells wurden mit *ab initio* Rechnungen von Heterostrukturen mit einer Vakuum Tunnelbarriere verglichen. Es zeigte sich, dass bereits das einfache Modell die Hot Spots qualitativ sehr gut beschreibt. So wurde durch den berechneten Leitwert von Co/Vakuum/Co(001) Strukturen nachgewiesen, dass die vollständige Transmission so lange erhalten bleibt, wie die Aufspaltung der beiden Resonanzen größer als deren Halbwertsbreite ist. Weiter wurde mit *ab initio* Rechnungen gezeigt, dass die Hot Spots einen großen Einfluss auf den Gesamtleitwert haben. In diesen Rechnungen wurden die Leitwerte von Heterostrukturen mit einer Vakuum Tunnelbarriere und unterschiedlichen Elektroden betrachtet. Für diese wurde der Anteil der Hot Spots an den Gesamtleitwert und ihre Fläche in der zweidimensionalen Brillouinzone berechnet. Die Hot Spots im Minoritätsband tragen bei symmetrischen oder bei nahezu symmetrischen Grenzflächen zu einem sehr großen Anteil von bis zu 65% an den Gesamtleitwert bei, existieren aber nur in einer winzigen Fläche von weniger als 0.05%

der zweidimensionalen Brillouinzone. Für nicht symmetrische Grenzflächen konnten keine Hot Spots im Minoritätsband gefunden werden. Das bedeutet, dass die Hot Spots eine symmetrische oder nahezu symmetrische Grenzfläche benötigen, damit sie vorhanden sind. Weiter wurde abgeschätzt, dass der Einfluss der Hot Spots für große Barrierendicken in Co/Vakuum/Co(001) Heterostrukturen exponentiell kleiner wird.

In Kapitel 6 wurde die **ballistische Spininjektion** von Fe in ZnSe und GaAs untersucht. Die betrachteten Heterostrukturen bestanden aus einem Fe und einem ZnSe bzw. GaAs Halbraum, die durch die Grenzflächenregion getrennt waren. Als Wachstumsrichtung wurden (001), (111) und (110) orientierte Strukturen betrachtet. In diesen Systemen wurde die ballistische Spininjektion anhand drei verschiedener Injektionsprozesse diskutiert.

Zuerst wurde die Injektion "heißer Elektronen" von Fe Zuständen oberhalb der Fermienergie in das Leitungsband des Halbleiters vorgestellt. Hierbei wurde der einfache Fall angenommen, dass die Elektronen senkrecht auf die Grenzfläche auftreffen. Diese Beschränkung wurde damit motiviert, dass sich in typischen Anwendungen die Fermienergie nur wenige 10meV oberhalb des Leitungsbandminimums befindet und somit der Fermiwellenvektor nur eine Länge von etwa einem Hundertstel der Brillouinzonenausdehnung aufweist. Dies rechtfertigt eine Betrachtung des Leitwertes nur am $\bar{\Gamma}$ Punkt ($\mathbf{k}_{\parallel} = 0$) der zweidimensionalen Brillouinzone. Dieses wurde auch anhand von \mathbf{k}_{\parallel} aufgelösten Leitwertberechnungen quantitativ nachgewiesen. Mit diesem Injektionsprozess wurde der Einfluss der Symmetrie der Wellenfunktionen auf die Transmission durch die Fe/Halbleiter Grenzfläche ausführlich diskutiert. Es wurde gezeigt, dass für (001) orientierte Heterostrukturen die unterschiedlichen Symmetrien der Fe Majoritäts- und Minoritätszustände an der Fermienergie für die sehr hohe Spinpolarisation verantwortlich sind. Dadurch koppeln die Fe Zustände unterschiedlich gut an die Halbleiterzustände des Leitungsbandes. Im Fe Majoritätsband existiert an der Fermienergie ein Δ_1 Zustand, der aus relativ delokalisierten s und p_z sowie d_{z^2} Orbitalen aufgebaut ist und in die Richtung des Halbleiters zeigt. Dagegen koppelt im Minoritätsband nur ein $\Delta_{2'}$ Zustand an das Leitungsband, der aus stärker lokalisierten d_{xy} Orbitalen besteht und hauptsächlich in der Grenzflächenebene ausgedehnt ist. Da die hohe Spinpolarisation durch den Symmetrieunterschied hervorgerufen wird, bezeichnen wir diesen Effekt als "symmetriebedingte hohe Spinpolarisation". Dagegen existiert kein gravierender Symmetrieunterschied zwischen den Majoritäts- und Minoritätszuständen in den (111) und (110) orientierten Strukturen. Für diese wurde nur eine geringere Spinpolarisation durch nicht symmetriebedingte Kopplungsunterschiede gefunden. Die so erhaltene Spinpolarisation zeigt eine stärkere Energieabhängigkeit und ändert sich bei unterschiedlichen Terminierungen drastisch. Dagegen ist die symmetriebedingte Spinpolarisation über einen großen Energiebereich relativ konstant und weitestgehend unempfindlich gegenüber Änderungen der Grenzflächeneigenschaften, solange die Symmetrie der [001] Richtung nicht verändert wird und die zweidimensionale Translationssymmetrie an der Grenzfläche erhalten bleibt.

Für den zweiten Injektionsprozess wurden die Potentiale im Halbleiter Halbraum so verschoben, dass die Elektronen an der Fermienergie vom Fe Halbraum direkt in das Leitungsband injiziert wurden. Dieser Prozess wurde "thermische Spininjektion" genannt. In den Fe/ZnSe(001) und Fe/GaAs(001) Heterostrukturen wurde bei der thermischen Injek-

tion eine Spinpolarisation von nahezu 100% für Energien bis etwa 40meV oberhalb des Leitungsbandminimums gefunden.

Im dritten Prozess wurde die Spininjektion von thermischen Elektronen durch eine Schottkybarriere an der Grenzfläche untersucht. Um eine Schottkybarriere zu simulieren, wurden Bulk ZnSe bzw. GaAs Potentiale so verschoben, dass die Fermienergie an der Grenzfläche effektiv in der Mitte der Bandlücke lag. In Richtung des Halbleiter Halbraums wurde die Barriere über eine bestimmte Dicke gleichmäßig linear erniedrigt, bis sich die Fermienergie 10meV über dem Leitungsbandminimum befand. Es wurde der Leitwert und die Spinpolarisation am $\bar{\Gamma}$ Punkt ($\mathbf{k}_{\parallel} = 0$) der zweidimensionalen Brillouinzone für unterschiedliche Schottkybarrierendicken berechnet. Für alle Terminierungen der Fe/ZnSe(001) und Fe/GaAs(001) Heterostrukturen wurde eine hohe Spinpolarisation gefunden. Dies war ebenfalls eine symmetriebedingte Spinpolarisation des Injektionsstroms. Die Zustände, die die Schottkybarriere am leichtesten durchqueren können, d.h. am wenigsten gedämpft werden, haben wie das Leitungsband eine Δ_1 Symmetrie. Allerdings wurde, besonders bei der Zn terminierten Fe/ZnSe(001) Struktur, ein wesentlicher Abfall der Spinpolarisation mit dicker werdender Schottkybarriere beobachtet. Anhand des Leitwerts konnte gesehen werden, dass dies durch eine verstärkte Transmission der Minoritätselektronen hervorgerufen wird. Die Ursache hierfür ist ein resonanter Grenzflächenzustand im Minoritätsband, der sich etwa 60meV unterhalb der Fermienergie befindet. Dieser Zustand liegt in der *s-d* Hybridisierungslücke und hat eine Δ_1 Symmetrie. Durch die reduzierte Symmetrie an der Grenzfläche im Vergleich zu einer freien Fe(001) Oberfläche wird der Δ_1 Grenzflächenzustand resonant an das Fe Δ_2' Band angekoppelt. Wird nun die Schottkybarriere vergrößert, so wird der Zustand durch die Wechselwirkung mit dem Leitungsband zur Fermienergie hin verschoben und sein Einfluss auf den Leitwert der Minoritätselektronen steigt stark an. Dies wurde auch in der Fe/GaAs(001) Struktur gefunden. Für die Se terminierte Fe/ZnSe(001) Struktur dagegen lag der Grenzflächenzustand energetisch zu weit von der Fermienergie entfernt, so dass eine konstant hohe Spinpolarisation für alle Schottkybarrierendicken gefunden wurde. Aus diesen Ergebnissen wurde der Grenzflächenwiderstand sowie die Polarisation der Grenzfläche berechnet. Diese Ergebnisse können direkt in analytische Modelle [34, 35] der diffusiven Spininjektion durch eine ballistische Schottkybarriere eingesetzt werden und sind somit auch für die diffusive Spininjektion wichtig und vom großen Nutzen. Der Einfluss des resonanten Grenzflächenzustands wurde auch bei der Spininjektion durch eine Schottkybarriere mit einer endlichen Bias-Spannung nachgewiesen.

Experimentell wurde in den letzten drei Jahren ein Durchbruch in der Spininjektion von Fe in Halbleiter erzielt. Nachdem viele frühere Versuche gescheitert waren [29–32], konnten erstmals Ploog und Mitarbeiter durch die Verwendung einer Schottkybarriere eine Spinpolarisation in Fe/GaAs(001) von 2% erzielen [36]. Hanbicki und Mitarbeiter steigerten diese auf 13% [102] und in diesem Jahr auf 32% [37]. Die starke Verbesserung führen die Autoren auf eine wesentliche Reduktion der Interdiffusion von Fe-Störstellen in den grenzflächennahen GaAs Bereich zurück. Dies ist in qualitativer Übereinstimmung mit der extrem hohen Spinpolarisation von nahe 100%, die unsere Rechnungen für die ideale Grenzfläche zeigen, und zwar für alle drei Injektionsprozesse. Dies stimmt auch mit den theoretischen Ergebnissen von Kelly und Mitarbeitern [117] für eine Fe/InAs(001) Grenzfläche überein, die

eine starke Reduzierung der Spinpolarisation mit zunehmender Grenzflächeninterdiffusion finden. Letzteres wird durch die Brechung der symmetriebedingten Auswahlregeln verursacht, die zu der fast 100% hohen Spinpolarisation führen. Es besteht daher die begründete Hoffnung, dass in naher Zukunft durch weitere Verbesserungen der Grenzflächenstruktur noch höhere Spinpolarisationen erzielt werden können, und so das Problem der Spininjektion, das lange als größte Hürde für die Verwirklichung der Spinelektronik angesehen wurde, in absehbarer Zukunft gelöst werden kann.

Anhang A

Lineare Antwort Theorie des Leitwertes

In diesem Anhang wird die Herleitung des Leitwerts in der linearen Antwort Theorie vorgestellt. Die Herleitung folgt der Arbeit von Baranger und Stone [38]. Hier wird allerdings der einfachere Fall betrachtet, dass kein äußeres Magnetfeld vorhanden ist. Die Geometrie des Systems ist in Abbildung 4.2 abgebildet. Für weitere Details wird auf Abschnitt 4.3 verwiesen. In der folgenden Herleitung wird die Spinentartung nicht berücksichtigt, und es werden keine atomaren Einheiten benutzt. Die Umformung auf atomare Einheiten ist am Schluss leicht ersichtlich.

H_0 ist der Einteilchen-Hamiltonoperator des betrachteten Systems mit einem effektiven Potential $U(\mathbf{r})$, aber ohne äußeres elektrisches Feld. Er hat einen vollständigen, orthonormalen Satz (VONS) von Eigenzuständen $\Psi_\alpha(\mathbf{r})$ mit Eigenwerten E_α

$$H_0\Psi_\alpha(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_\alpha(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\Psi_\alpha(\mathbf{r}) = E_\alpha\Psi_\alpha(\mathbf{r}). \quad (\text{A.1})$$

In diesem System wird die lineare Antwort auf eine kleine Störung durch ein äußeres elektrisches Potential bzw. Feld mit der Frequenz Ω gesucht, das adiabatisch für $t \rightarrow 0$ eingeschaltet wird

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) \cos(\Omega t) e^{-\delta|t|} \quad (\text{A.2})$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E(\mathbf{r}) \cos(\Omega t) e^{-\delta|t|} \quad \text{mit} \quad E(\mathbf{r}) = -\nabla\Phi(\mathbf{r}). \quad (\text{A.3})$$

Der gestörte Hamiltonoperator lautet (mit der Elektronenladung $q = -e$)

$$H = H_0 + H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) + e\Phi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{A.4})$$

Stromdichteoperator und nicht-lokaler Leitfähigkeitstensor

Für das gestörte System wird der Erwartungswert des Stromdichteoperators $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r})$ berechnet. Der Stromdichteoperator lautet

$$\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}) = \frac{e}{2m} \left[n(\mathbf{r})\mathbf{p} + \mathbf{p}n(\mathbf{r}) \right], \quad (\text{A.5})$$

wobei m die Elektronenmasse und $n(\mathbf{r})$ der Teilchendichte- und \mathbf{p} der Impulsoperator ist. Mit dem beidseitigen Ableitungsoperator $\overleftrightarrow{\nabla}$

$$g \overleftrightarrow{\nabla} h = g \nabla h - h \nabla g = -h \overleftrightarrow{\nabla} g \quad (\text{A.6})$$

lauten die Matrixelemente des Stromdichteoperators in der Darstellung des VONS des ungestörten Systems

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r})]_{\beta\alpha} &= \int \Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}) \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) d^3r = \frac{e\hbar}{2mi} \left[\Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}) \overleftrightarrow{\nabla} \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \right] \\ &= \frac{e\hbar}{2mi} \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Für $\mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ gilt bei Vertauschung der Indizes

$$\mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = -\mathbf{W}_{\beta\alpha}^*(\mathbf{r}). \quad (\text{A.8})$$

Im Folgenden wird $\nabla \cdot \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ benötigt. Mit der Schrödingergleichung (A.1) erhält man

$$\nabla \cdot \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2} E_{\beta\alpha} \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.9})$$

mit der Abkürzung $E_{\beta\alpha} = E_{\beta} - E_{\alpha}$.

Die Dichtematrix $\rho = \rho_0 + \rho_1(t)$ setzt sich zusammen aus einem Anteil des ungestörten ρ_0 und des gestörten $\rho_1(t)$ Systems. Die ungestörte Dichtematrix ist zeitunabhängig

$$\rho_0 = \int f(E_{\alpha}) |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| d\alpha, \quad (\text{A.10})$$

wobei $f(E)$ die Fermi-Dirac Verteilung ist. Die zeitliche Entwicklung der Dichtematrix $\rho_1(t)$ ist bis zu Termen linearer Ordnung gegeben durch

$$i\hbar \frac{d(\rho_0 + \rho_1(t))}{dt} = [H_0 + H_1, \rho_0 + \rho_1(t)] \quad (\text{A.11})$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d\rho_1(t)}{dt} = [H_0, \rho_1(t)] + [H_1, \rho_0]. \quad (\text{A.12})$$

An dieser Stelle werden folgende Abkürzungen eingeführt

$$f_{\beta\alpha} = f(E_{\beta}) - f(E_{\alpha}) \quad (\text{A.13})$$

$$\Phi_{\alpha\beta} = \int \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) d^3r. \quad (\text{A.14})$$

Die gestörte Dichtematrix dargestellt in dem VONS des ungestörten Systems für $t < 0$ ($t > 0$ ergibt dasselbe Ergebnis im statischen Fall [38])

$$[\rho_1(t < 0)]_{\alpha\beta} = \frac{e}{2} f_{\beta\alpha} \Phi_{\alpha\beta} e^{\delta t} \left(\frac{e^{+i\Omega t}}{E_{\beta\alpha} - \hbar\Omega + i\hbar\delta} + \frac{e^{-i\Omega t}}{E_{\beta\alpha} + \hbar\Omega + i\hbar\delta} \right). \quad (\text{A.15})$$

Somit lautet der Erwartungswert des Stromdichteoperators in linearer Näherung

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \underbrace{\text{Sp}(\rho_0 \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}))}_{\mathbf{J}_0(\mathbf{r})} + \underbrace{\text{Sp}(\rho_1(t) \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}))}_{\mathbf{J}_1(\mathbf{r},t)}. \quad (\text{A.16})$$

Der Stromdichteerwartungswert \mathbf{J}_0 der ungestörten Dichtematrix verschwindet stets aufgrund der Zeitinversionssymmetrie. Die Spur des gestörten Stromdichteerwartungswerts wird in dem VONS des ungestörten Systems berechnet

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1(\mathbf{r}, t) &= \iint \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}) \rho_1(t) \left[\Psi_\beta(\mathbf{r}) \Psi_\beta^*(\mathbf{r}) \right] \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}) \Psi_\alpha(\mathbf{r}) d\beta d\alpha \\ &= \iint [\rho_1(\mathbf{r}, t)]_{\alpha\beta} [\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r})]_{\beta\alpha} d\beta d\alpha. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Mit den Matrixelemente des Stromdichteoperators (A.7) und der gestörten Dichtematrix (A.15) ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1(\mathbf{r}, t < 0, \Omega, \delta) &= \frac{e^2 \hbar}{4mi} \iint f_{\beta\alpha} \Phi_{\alpha\beta} \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) e^{\delta t} \\ &\quad \left(\frac{e^{+i\Omega t}}{E_{\beta\alpha} - \hbar\Omega + i\hbar\delta} + \frac{e^{-i\Omega t}}{E_{\beta\alpha} + \hbar\Omega + i\hbar\delta} \right) d\beta d\alpha. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Wie in Ref. [38] gezeigt wird, können in (A.18) nicht einfach die beiden Grenzwerte $\delta \rightarrow 0$ und $\Omega \rightarrow 0$ gezogen werden, da für $\alpha \rightarrow \beta$ das Produkt einer singulären Funktion ($\Phi_{\alpha\beta}$) mit einer verschwindenden Funktion ($f_{\beta\alpha}$) bestimmt werden muss. $\Phi_{\alpha\beta}$ wird singulär, da die Eigenzustände auf $\delta(\alpha - \beta)$ normiert sind und das elektrische Potential $\Phi(\mathbf{r})$ unendlich ausgedehnt ist (siehe Gleichung (A.14)).

Daher wird ein anderer Weg eingeschlagen und anstelle des elektrischen Potentials das elektrische Feld betrachtet. Das elektrische Feld ist nach Voraussetzung im asymptotischen Bereich der Elektroden Null. Dazu wird in den Elektroden ein Koordinatensystem gelegt, wie es in Abbildung 4.2 dargestellt ist. Dabei ist $\hat{\mathbf{x}}_n$ der Einheitsvektor parallel zu den Elektroden und auswärts gerichtet, \mathbf{y}_n der zweidimensionale Vektor senkrecht zu $\hat{\mathbf{x}}_n$ und A_n die Querschnittsfläche der n -ten Elektrode an der Stelle x_n . Im asymptotischen Bereich der Elektroden ist das elektrische Potential nach Voraussetzung konstant und hat in der n -ten Elektrode den Wert U_n . Dazu wird Gleichung (A.9) mit $\Phi(\mathbf{r}') f_{\beta\alpha}$ multipliziert und durch $-2m/\hbar^2 E_{\beta\alpha}$ dividiert, über das Streuvolumen mit den Randflächen A_n integriert und der Gausschen Satz angewendet:

$$\begin{aligned} f_{\beta\alpha} \int_V \Phi(\mathbf{r}') \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \Psi_\beta(\mathbf{r}') d^3 r' &= \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_{\beta\alpha}}{E_{\beta\alpha}} \int_V \mathbf{E}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') d^3 r' &- \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n=1}^{N_L} U_n \frac{f_{\beta\alpha}}{E_{\beta\alpha}} \int_{A_n} \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{x}}_n d^2 y'_n, \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

wobei N_L die Zahl der angeschlossenen Elektroden ist. Es wurde folgende Beziehung benutzt

$$\Phi(\mathbf{r}') \nabla' \cdot \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') = \nabla' \cdot [\Phi(\mathbf{r}') \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}')] + \mathbf{E}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}'). \quad (\text{A.20})$$

Nun wird der Grenzfall betrachtet, dass die Querschnittsflächen unendlich weit von dem Streuvolumen entfernt werden ($x_n \rightarrow \infty$). Wie in Ref. [38] gezeigt wird, ist in der rechte Term auf der rechten Seite von Gleichung (A.19) Null.

Weiter wird an dieser Stelle die Störung adiabatisch eingeschaltet ($\delta \rightarrow 0$). Hierzu wird dieselbe Relation wie bei der Berechnung der Elektronendichte aus der Green-Funktion verwendet

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{E_{\beta\alpha} \pm i\hbar\Omega + i\hbar\delta} = -i\pi\delta(E_{\beta\alpha} \pm \hbar\Omega) + P\left[\frac{1}{E_{\beta\alpha} \pm \hbar\Omega}\right]. \quad (\text{A.21})$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t < 0, \Omega) &= \frac{ie^2\hbar^3}{8m^2} \int d\alpha \int d\beta \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \frac{f_{\beta\alpha}}{E_{\beta\alpha}} \int_V \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') d^3r' \\ &\times \left[\cos(\Omega t) \left(-i\pi\delta(E_{\beta\alpha} - \hbar\Omega) - i\pi\delta(E_{\beta\alpha} + \hbar\Omega) + P\left[\frac{1}{E_{\beta\alpha} - \hbar\Omega}\right] + P\left[\frac{1}{E_{\beta\alpha} + \hbar\Omega}\right] \right) \right. \\ &\left. + i \sin(\Omega t) \left(-i\pi\delta(E_{\beta\alpha} - \hbar\Omega) + i\pi\delta(E_{\beta\alpha} + \hbar\Omega) + P\left[\frac{1}{E_{\beta\alpha} - \hbar\Omega}\right] - P\left[\frac{1}{E_{\beta\alpha} + \hbar\Omega}\right] \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Um mit dieser Gleichung den zweiten Grenzwertprozess $\Omega \rightarrow 0$ durchzuführen, wird für die δ Funktion folgender Ausdruck

$$\lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{f(E_\alpha \pm \hbar\Omega) - f(E_\alpha)}{\pm \hbar\Omega} = +f'(E_\alpha) \quad (\text{A.23})$$

und für den Cauchyschen Hauptwert

$$\lim_{\Omega \rightarrow 0} P\left[\frac{1}{E_{\beta\alpha} \pm \hbar\Omega}\right] = P\left[\frac{1}{E_{\beta\alpha}}\right] \quad (\text{A.24})$$

benutzt. Damit verschwindet der Sinus-Term in (A.22) und der dissipative Kosinus Term ergibt

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}) &= \frac{e^2\hbar^3\pi}{4m^2} \iint \left(f'(E_\alpha)\delta(E_{\beta\alpha}) + \frac{i}{\pi} \frac{f_{\beta\alpha}}{E_{\beta\alpha}} P\left[\frac{1}{E_{\beta\alpha}}\right] \right) \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \\ &\int_V \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') d^3r' d\beta d\alpha. \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Die Stromdichte ist mit dem elektrischen Feld im Kristall über den nicht-lokalen Leitfähigkeitstensor $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ verknüpft

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \int_V \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') d^3r'. \quad (\text{A.26})$$

Ein Vergleich mit Gleichung (A.25) liefert für $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2 \hbar^3 \pi}{4m^2} \iint \left(f'(E_\alpha) \delta(E_{\beta\alpha}) + \frac{i}{\pi} \frac{f_{\beta\alpha}}{E_{\beta\alpha}} P \left[\frac{1}{E_{\beta\alpha}} \right] \right) \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') d\beta d\alpha. \quad (\text{A.27})$$

Dieser Ausdruck lässt sich weiter vereinfachen, wenn der Zeitinversionsoperator τ auf $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ angewendet wird. Dafür wird das Verhalten von $\mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ bei Zeitinversion benötigt

$$\tau(\mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r})) = \mathbf{W}_{\tau(\beta)\tau(\alpha)}(\mathbf{r}) = \mathbf{W}_{\beta\alpha}^*(\mathbf{r}).$$

Mit der Beziehung (A.8) ergibt sich

$$\tau(\mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r})) = \mathbf{W}_{\beta\alpha}^*(\mathbf{r}) = -\mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.28})$$

Wird der Zeitinversionsoperator auf den nicht-lokalen Leitfähigkeitstensor angewendet, die Beziehung (A.28) benutzt und anschließend die Integrationsvariablen α und β vertauscht, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \tau(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) = \\ &= \frac{e^2 \hbar^3 \pi}{4m^2} \iint \left(f'(E_\alpha) \delta(E_{\beta\alpha}) - \frac{i}{\pi} \frac{f_{\beta\alpha}}{E_{\beta\alpha}} P \left[\frac{1}{E_{\beta\alpha}} \right] \right) \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') d\beta d\alpha, \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

da die δ Funktion gerade und der Cauchysche Hauptwert ungerade bei Vertauschung der Integrationsvariablen ist. Daher ist der Cauchysche Hauptwert hier Null. Bei einem äußeren Magnetfeld wird er dagegen wichtig [38]. Somit ergibt sich der nicht-lokale Leitfähigkeitstensor zu

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2 \hbar^3 \pi}{4m^2} \iint f'(E_\alpha) \delta(E_{\beta\alpha}) \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') d\beta d\alpha. \quad (\text{A.30})$$

Offensichtlich ist der Leitfähigkeitstensor symmetrisch in \mathbf{r} und \mathbf{r}'

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}', \mathbf{r}). \quad (\text{A.31})$$

Für den Stromdichteerwartungswert $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ gilt mit Gleichung (A.9)

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0. \quad (\text{A.32})$$

Das bedeutet, dass der Stromdichteoperator die Stromerhaltung erfüllt. Für den nicht-lokalen Leitfähigkeitstensor ergibt sich mit Gleichung (A.26) folgende Bedingung für die Stromerhaltung

$$\vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \overleftarrow{\nabla}' = 0, \quad (\text{A.33})$$

wobei der Pfeil angibt, auf welcher Seite die Divergenz wirkt.

Leitwertkoeffizienten

Die beim ballistischen Transport wichtige Größe ist der Leitwert und weniger der lokale Leitfähigkeitstensor, da die spezielle Probengeometrie und Störstellenkonfiguration den Strom entscheidend beeinflussen. In diesem Zusammenhang würde die Leitfähigkeit nur als Mittelung über verschiedene Störstellenkonfigurationen einen Sinn machen [38]. Die Leitwertkoeffizienten G_{mn} verknüpfen den Strom durch die m -te Elektrode I_m mit der angelegten Spannung U_n

$$I_m = \int_{A_m} \mathbf{J}(\mathbf{x}_m) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m d^2 y_m = \sum_n G_{mn} U_n. \quad (\text{A.34})$$

Dabei ist die Stromdichte I_m positiv, wenn der Strom aus dem Streuvolumen herausfließt. Die Leitwertkoeffizienten, ausgedrückt durch den nicht-lokalen Leitfähigkeitstensor, ergeben sich mit dem Gausschen Satz und Gleichung (A.33) zu

$$G_{mn} = - \int_{A_m} \int_{A_n} \hat{\mathbf{x}}_m \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{x}}_n d^2 y_m d^2 y'_n. \quad (\text{A.35})$$

Diese Formel besagt anschaulich, dass die Leitwertkoeffizienten der Fluss des nicht-lokalen Leitfähigkeitstensor durch die entsprechenden Elektroden ist. Wird der Leitfähigkeitstensor aus (A.30) in die Gleichung (A.35) eingesetzt, so erhält man

$$G_{mn} = - \frac{e^2 \hbar^3 \pi}{4m^2} \iint f'(E_\alpha) \delta(E_{\beta\alpha}) \int_{A_m} \hat{\mathbf{x}}_m \cdot \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}_m) \int_{A_n} \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}'_n) \cdot \hat{\mathbf{x}}_n d^2 y'_n d^2 y_m d\beta d\alpha. \quad (\text{A.36})$$

Green-Funktions Ausdruck für den nicht-lokalen Leitfähigkeitstensor

Da die Berechnungen der Größen in der Darstellung des VONS des ungestörten Systems nicht sehr praktisch ist, weil der gesamte Basissatz an der Fermienergie berechnet werden müsste, wird im Folgenden ein Green-Funktions Ausdruck für den nicht-lokalen Leitfähigkeitstensor bestimmt.

Dazu wird die Spektraldarstellung der Green-Funktion im VONS des ungestörten Systems verwendet. In der hier verwendeten Nomenklatur lautet diese

$$G^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \int \frac{\Psi_\alpha(\mathbf{r}) \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}')}{E - E_\alpha \pm i\eta} d\alpha, \quad (\text{A.37})$$

wobei η eine infinitesimale, positive Größe ist. G^+ ist die retardierte und G^- die avancierte Green-Funktion. Damit ergibt sich folgende Differenz

$$\begin{aligned} \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) &= G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) - G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \\ &= -2\pi i \int \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}') \delta(E - E_\alpha) d\alpha. \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Mit $\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}' = (\vec{\nabla} - \overleftarrow{\nabla}) \cdot (\vec{\nabla}' - \overleftarrow{\nabla}')$ gilt weiter

$$\mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') = -\Psi_{\alpha}(\mathbf{r})\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}') \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}' \Psi_{\beta}(\mathbf{r}')\Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}). \quad (\text{A.39})$$

Es wird eine zusätzliche Integration über $\int \delta(E - E_{\alpha})\delta(E - E_{\beta}) dE$ eingeführt, um den Fermienergiecharakter zu verdeutlichen. Damit lautet der nicht-lokale Leitfähigkeitstensor (A.30) mit (A.38) und (A.39)

$$\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2 \hbar^3}{16\pi m^2} \int_{-\infty}^{\infty} [-f'(E)] \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}' \Delta G(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E) dE. \quad (\text{A.40})$$

Über das Volumen integriert und im homogenen elektrischen Feld ergibt diese Formel die Kubo-Formel für den longitudinalen Leitfähigkeitstensor [38, 133–135].

Green-Funktions Ausdruck für die Leitwertkoeffizienten

Um einen Green-Funktions Ausdruck für die Leitwertkoeffizienten zu erhalten, wird der nicht-lokale Leitfähigkeitstensors (A.40) in die Gleichung für die Leitwertkoeffizienten (A.35) eingesetzt

$$G_{mn} = -\frac{e^2 \hbar^3}{16\pi m^2} \int_{-\infty}^{\infty} [-f'(E)] \int_{A_m} \int_{A_n} \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) (\hat{\mathbf{x}}_m \cdot \vec{\nabla}) (\vec{\nabla}' \cdot \hat{\mathbf{x}}_n) \Delta G(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E) d^2 y_m d^2 y'_n dE. \quad (\text{A.41})$$

Nach Ref. [38] verschwinden in obiger Gleichung für $m \neq n$ die Terme mit $G^+ G^+$ und $G^- G^-$ bei der Integration über die Elektrodenquerschnittsflächen. Somit bleibt für $m \neq n$

$$G_{mn} = -\frac{e^2 \hbar^3}{8\pi m^2} \int_{-\infty}^{\infty} [-f'(E)] \int_{A_m} \int_{A_n} G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) (\hat{\mathbf{x}}_m \cdot \vec{\nabla}) (\vec{\nabla}' \cdot \hat{\mathbf{x}}_n) G^-(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E) d^2 y_m d^2 y'_n dE. \quad (\text{A.42})$$

In dieser Arbeit wird der einfache Fall angenommen, dass nur zwei Elektroden an das Streuvolumen angeschlossen sind. Dieser Ausdruck für die Leitwertkoeffizienten wird in Kapitel 4 auf die in dieser Arbeit betrachtete Schichtgeometrie angepasst.

Anhang B

Evaneszente Zustände in der Leitwertberechnung

In diesem Anhang wird gezeigt, dass sich die beiden Ebenen im asymptotischen Bereich der Elektroden befinden müssen, wo alle evaneszenten Wellen bereits hinreichend abgeklungen sind. Weiter wird diskutiert, wo der asymptotische Bereich in realen Rechnungen anfängt.

Bei dem hier betrachteten System handelt es sich um eine Fe/GaAs(001) Heterostruktur mit einer Ga terminierten abrupten Grenzfläche. Für Details der Berechnung wird auf Kapitel 6 verwiesen. Die Gitterkonstante von GaAs beträgt $d = 10.85$ a.u. An der Grenzfläche ist eine 8 Monolagen (ML) dicke Schottkybarriere eingefügt ($8 \text{ ML} = 2d$). Damit wird erreicht, dass sich der Grenzflächenzustand im Minoritätsband ausbilden kann. Die Fermienergie im GaAs Halbkristall liegt 10 meV oberhalb des Leitungsbandminimums. Der schematische Bandverlauf ist in Abbildung B.1 skizziert. Die linke Leitwertebene A befindet sich 4 ML von der Grenzfläche entfernt im Fe. Im Folgenden wird der Abstand der zweiten Ebene A' von der Grenzfläche in der Bulk GaAs Seite variiert. Es wird dabei im GaAs über die zwei nicht-äquivalenten Monolagen gemittelt.

Wie in Kapitel 6 gezeigt wurde, wird in der Schottkybarriere im Minoritätsband ein Grenzflächenzustand erzeugt. Dieser besitzt eine $\Delta_1(C_{4v})$ Symmetrie und liegt in der $\Delta_1(C_{4v})$ Hybridisierungslücke der Minoritätselektronen. Durch die Wechselwirkung mit dem $\Delta_1(C_{2v})$ Leitungsband von GaAs wird der Grenzflächenzustand für eine 8 ML dicke Barriere energetisch von der Fermienergie weggeschoben. Das bedeutet, dass der Grenzflächenzustand vom $\bar{\Gamma}$ Punkt zum Rand der zweidimensionalen Brillouinzone (2DBZ) geschoben wird und bei der hier betrachteten Fermienergie außerhalb der Fermikugel im Bulk GaAs Halbraum liegt. Daher fällt der Grenzflächenzustand exponentiell von der Grenzfläche weg ab und kann nicht zum Stromtransport beitragen. Allerdings hat dieser eine hohe Intensität, wie im Folgenden gezeigt wird.

In Abbildung B.2 ist der Leitwert in Abhängigkeit des \mathbf{k}_{\parallel} Vektors auf der Hauptsymmetrielinie $\bar{\Gamma}-\bar{X}$ für Minoritätselektronen dargestellt. Im oberen Bild befindet sich die zweite Ebene 16 ML ($4d$) von der Grenzfläche entfernt im GaAs und im unteren Bild 88 ML ($22d$). In den Bildern ist der Fermiwellenvektor bzw. die Grenze der Fermikugel im Bulk GaAs mit einer senkrechten Linie mit $\mathbf{k}_{\parallel,F} = 0.015 \times 2\pi/d$ markiert. Bei der Leitwertebene in der Nähe

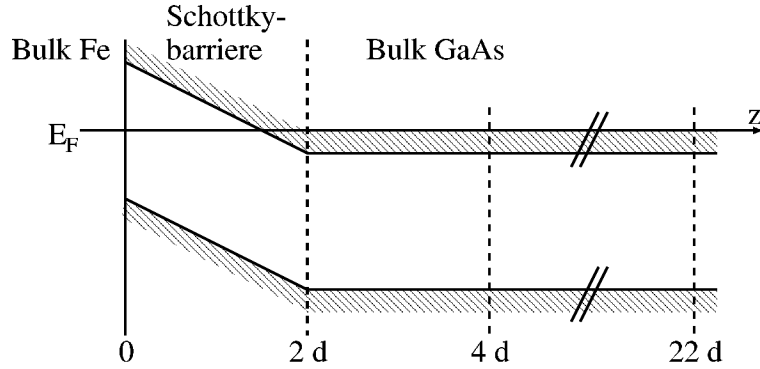


Abbildung B.1: Schematischer Bandverlauf bei $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ in Fe/GaAs(001) mit einer 8 ML ($2d$) dicken Schottkybarriere an der Grenzfläche. Die Fermienergie liegt 10 meV oberhalb des Leitungsbandminimums im GaAs(001) Halbraum. Der Abstand der rechten Leitebene von der Grenzfläche wird zwischen 1–22 d variiert ($1d = 4$ ML). d ist die Gitterkonstante von GaAs.

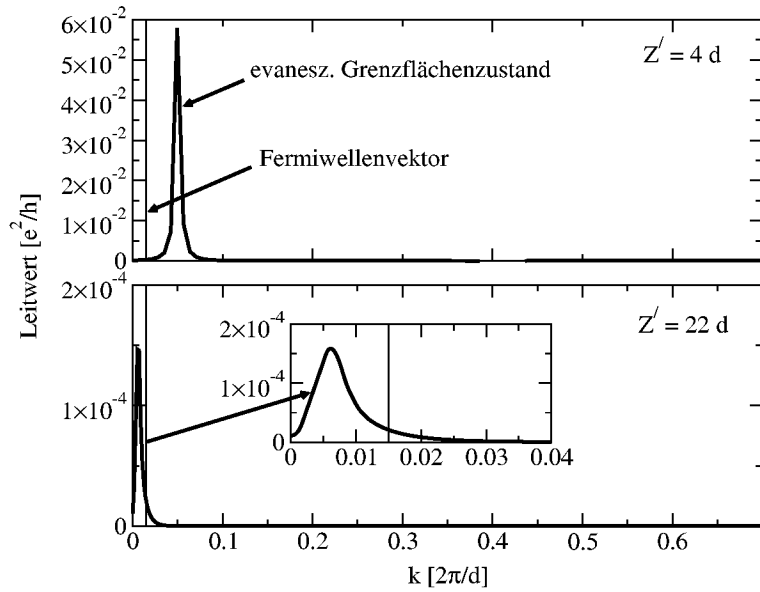


Abbildung B.2: Leitwert in Fe/GaAs(001) mit einer Ga terminierten abrupten Grenzfläche und einer 8 ML dicken Schottkybarriere für Minoritätselektronen entlang der $\bar{\Gamma}$ - \bar{X} Hauptsymmetrielinie. Im oberen Bild hat die Leitebene A' einen Abstand von der Fe/GaAs Grenzfläche von $4d$ und im unteren von $22d$. Die Fermienergie befindet sich 10 meV oberhalb des Leitungsbandminimums. Der resultierende Fermiwellenvektor ist durch senkrechte Linien markiert. d ist die Gitterkonstante von GaAs. Man beachte die unterschiedlichen Leitwertskalen.

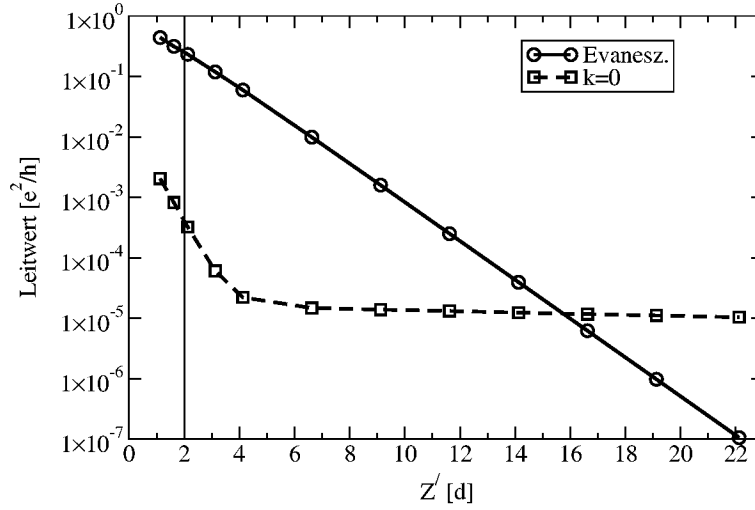


Abbildung B.3: Leitwert in Fe/GaAs(001) mit einer 8 ML dicken Schottkybarriere im Minoritätsband für $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ (gestrichelte Linie) und durch den Grenzflächenzustand (durchgezogene Linie) in Abhängigkeit des Abstandes der zweiten Leitwertebene A' . Die Dicke der Schottkybarriere ist durch eine senkrechte Linie markiert. Man beachte die logarithmische Leitwertskala. d ist die Gitterkonstante von GaAs.

der Grenzfläche (oberes Bild) ist deutlich der Grenzflächenzustand bei $\mathbf{k}_{\parallel} = 0.05 \times 2\pi/d$ im Leitwert zu beobachten, obwohl er sich außerhalb der Fermikugel befindet. Er zeigt sogar einen um mehrere Größenordnungen höheren Leitwert als die erlaubten Zustände innerhalb der Fermikugel. Wird der Leitwert durch eine Ebene $22d$ von der Grenzfläche entfernt bestimmt (unteres Bild), so ist der Grenzflächenzustand nicht mehr zu beobachten. Der Leitwert wird bestimmt von den propagierenden Zuständen innerhalb der Fermikugel. Der Verlauf des Leitwertes ist in Kapitel 6.2 erläutert.

Um den exponentiellen Abfall des Grenzflächenzustands besser zu erkennen, ist in Abbildung B.3 der Leitwert durch den Grenzflächenzustand bei $\mathbf{k}_{\parallel} = 0.05 \times 2\pi/d$ und am $\bar{\Gamma}$ Punkt bei $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ in Abhängigkeit des Abstandes der Ebene A' von der Grenzfläche dargestellt. Deutlich kann das starke exponentielle Abfallen des evaneszenten Grenzflächenzustands (durchgezogene Linie) mit größerem Abstand der Leitwertebene von der Grenzfläche erkannt werden. Bis zu einem Abstand von etwa $16d$ bestimmt der Grenzflächenzustand fälschlicherweise den gesamten Leitwert.

Wie in Kapitel 4 erläutert, wird ein kleiner Imaginärteil der Energie bei der Berechnung des Leitwertes aus numerischen Gründen verwendet, wodurch der Leitwert etwas über der Energie verschmiert wird. Durch dieses Mischen der Zustände fällt der Leitwert ebenfalls leicht exponentiell für größere Abstände ab. Um zu zeigen, dass der starke Abfall des Grenzflächenzustandes nicht von dem Imaginärteil der Energie stammt, ist zum Vergleich der Leitwert am $\bar{\Gamma}$ Punkt berechnet worden (gestrichelte Linie). Liegt die Leitwertebene in der Schottkybarriere ($Z' < 2d$), so sieht man einen exponentiellen Abfall des Leitwertes

am $\bar{\Gamma}$ Punkt aufgrund der komplexen Bandstruktur [86] in der Bandlücke. Für Abstände größer als etwa $5d$ sind alle evaneszenten Zustände am $\bar{\Gamma}$ Punkt abgeklungen und der Leitwert ist praktisch konstant. Durch den kleinen Imaginärteil der Energie ist ein leichtes exponentielles Abfallen vorhanden, das aber viel schwächer ist als das des evaneszenten Grenzflächenzustandes.

Der Einfluss der Energieverbreiterung durch den Imaginärteil der Energie ist abhängig von der Form des Leitwertes in der 2DBZ, da eine Verbreiterung der Energie auch eine Mischung der Zustände in der 2DBZ bewirkt. So ist der Einfluss besonders groß, wenn die Breite des Leitwertmaximums gleich oder kleiner als die Verschmierung der Zustände in der 2DBZ ist. In diesem Fall verbreitert sich das Maximum mit größerem Abstand der beiden Leitwertebenen relativ stark und gleichzeitig wird die Höhe des Maximums drastisch reduziert. Dies kann deutlich an den sehr scharfen Fabry-Perot ähnlichen Resonanzen in Fe/ZnSe/Fe(001) für Minoritätselektronen bei $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ beobachtet werden (siehe Ref. [118]).

Anhand dieser Rechnungen wird deutlich, dass im Falle von Grenzflächenzuständen die korrekte Leitwertberechnung aufwendig sein kann, da eventuell viele Monolagen in das System eingefügt werden müssen, um die unerlaubten (evaneszenten) Zustände hinreichend zu dämpfen. In dem hier gezeigten System sind alleine aus diesem Grund 80 ML (160 Atome) Bulk GaAs zusätzlich eingefügt worden, nur um die evaneszenten Zustände zu unterdrücken.

Nun soll die Frage diskutiert werden, wo die beiden Leitwertebenen in realen Rechnungen plazierte werden sollten. Da generell aus Rechenzeitgründen kleine System bevorzugt werden, sollten die Leitwertebenen einen kleinen Abstand haben. Bei Zuständen in Kristallen mit beweglichen Ladungsträgern, wie z.B. in Metallen oder innerhalb der Fermikugel von Halbleitern, reicht es typischerweise aus, den Leitwert 4–20 ML von dem Streuzentrum entfernt zu berechnen. Langsam abfallende Zustände existieren in der Bandlücke und zwar besonders in der Nähe der Fermikugel, da dort der komplexe \mathbf{k} Vektor eine kleine Dämpfungskonstante besitzt [86]. Sind dies wie in diesem Fall Grenzflächenzustände mit einer hohen Intensität, so müssen teilweise sehr viele Monolagen eingefügt werden. Da die Fermikugel bekannt ist, können diese (unphysikalischen) Zustände leicht identifiziert werden.

Da der nicht verschwindende Imaginärteil der Energie ebenfalls ein schwaches exponentielles Abfallen des Leitwerts zur Folge hat, sollte, wenn der Leitwert von zwei verschiedenen Rechnungen miteinander verglichen werden soll, die Position der Leitwertebenen gleich gehalten werden. Dies ist besonders für große Systeme mit sehr schmalen Leitwertmaxima wichtig.

Anhang C

Mittelwertbildung bei der Leitwertberechnung

In diesem Anhang werden zwei Testrechnungen vorgestellt, die zeigen, dass in Materialien mit zwei oder mehreren nicht-identischen Monolagen (ML) pro Einheitszelle, der Leitwert über alle Kombinationen von ML der Einheitszelle oder ein ganzzahliges Vielfaches davon gemittelt werden muss. Im ersten Teil wird dies an einem Modellkristall mit Potentialen konstanter Höhe und im zweiten an Bulk ZnSe(001) für Energien im Leitungsband gezeigt.

C.1 Modellkristall mit konstanten Potentialen

Im Folgenden wird die Notwendigkeit der Mittelwertbildung anhand eines einfachen Modellkristalls untersucht, der aus ASA Potentialen mit unterschiedlichen konstanten Potentialhöhen besteht. Der Modellkristall besitzt lokal eine bcc-artige Struktur mit der Fe Gitterkonstante ($d = 5.425$ a.u.). Der Stromtransport wird in $[001]$ Richtung am $\bar{\Gamma}$ Punkt ($\mathbf{k}_{\parallel} = 0$) untersucht. Der Struktur des Modellkristalls ist in Abbildung C.1 (links) dargestellt. Zur Berechnung des Stromtransport befinden sich 16 Potentiale in dem Grenzflächenbereich zwischen zwei Halbräumen, die die Modellstruktur ideal fortsetzen. Die beiden Leitwertebenen, zwischen denen der Leitwert bestimmt wird, werden im Folgenden mit dem entsprechenden Atomindex (1...16) bezeichnet (siehe Numerierung in Abbildung C.1 rechts).

Es werden drei verschiedene Modellkristalle untersucht, indem für die vier verschiedenen Potentiale unterschiedliche Potentialhöhen angenommen werden: Im Kristall I sind die vier Potentiale identisch und haben eine konstante Höhe von 0 Ryd, d.h. es wird der leere Raum beschrieben. Somit besteht die Einheitszelle nur aus einem Atom. Im Kristall II sind jeweils zwei der vier Potentiale identisch: die Potentiale 1 und 3 besitzen eine konstante Potentialhöhe von -1.4eV und die Potentiale 2 und 4 von +1.4eV. Damit befinden sich zwei unterschiedliche Atome in der Einheitszelle, bzw. es gibt zwei nicht-identische ML pro Elementarzelle. Im Kristall III sind alle vier Potentiale unterschiedlich gewählt: Das Potential 1 hat eine Höhe von -5.4eV, Potential 2 von -1.4eV, Potential 3 von +1.4eV

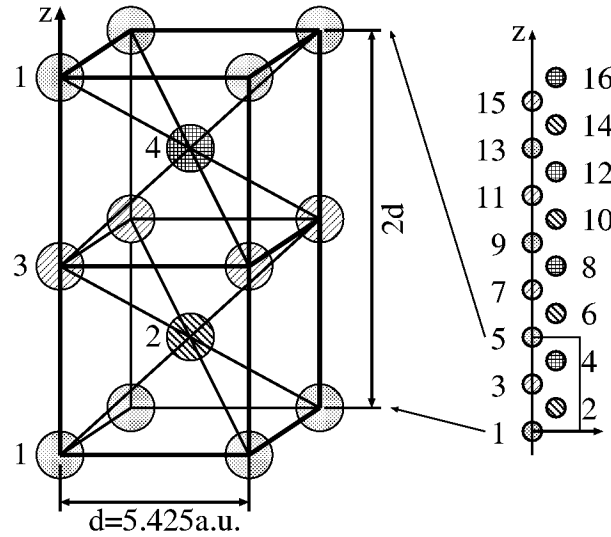


Abbildung C.1: Kristallstruktur des Modellkristalls mit ASA Potentialen unterschiedlicher konstanter Höhe. Der Kristall besitzt lokal eine bcc-artige Struktur. Jede Monolage ist aus unterschiedlichen Potentialen 1, 2, 3 und 4 aufgebaut (links). Der Stromtransport wird in $[001]$ Richtung untersucht (z Richtung). Links ist eine Einheitszelle vergrößert und rechts sind alle 16 Atome des Grenzflächenbereichs mit deren Atomindizes zwischen den beiden Halbräumen dargestellt.

und Potential 4 von $+5.4 \text{ eV}$. Somit hat dieser Kristall vier verschiedene Atome bzw. ML pro Einheitszelle. Die Potentialhöhen der drei Kristalle sind willkürlich gewählt und haben keinen Einfluss auf das zu Zeigende.

In Abbildung C.2 ist die Bandstruktur der drei Modellkristalle in der zweidimensionalen Geometrie am $\bar{\Gamma}$ Punkt in $[001]$ Richtung dargestellt. Man beachte, dass hierbei die Gitterkonstante d stets die Fe bcc-Gitterkonstante (5.425 a.u.) ist. Da die Einheitszelle des II. Kristalls doppelt so groß in $[001]$ Richtung ist als der I. Kristall, ist seine Brillouinzone in k_z Richtung nur halb soweit ausgedehnt. Daher geht die erste Brillouinzone des II. Kristalls bis $0.5 \times 2\pi/d$. Die Einheitszelle des III. Kristalls ist dagegen viermal größer und somit geht seine erste Brillouinzone nur bis $0.25 \times 2\pi/d$. Die Grenzen der jeweiligen Brillouinzone sind in Abbildung C.2 durch senkrechte Linien angedeutet.

Es wird der Leitwert in diesen Kristallen bei 3.4 eV berechnet. In den Bandstrukturen ist erkennbar, dass bei dieser Energie in allen drei Modellkristallen ein Stromkanal vorhanden ist. Daher wird ein Leitwert von 1 in Einheiten von $2e^2/h$ (spinunabhängig) erwartet. Die Aufspaltungen der Bänder des Kristalls II und III an der Grenze der Brillouinzone lassen sich im Rahmen des Modells nahezu freier Elektronen verstehen.

Um zu zeigen, dass der Leitwert bei Einheitszellen mit zwei oder mehreren nicht-identischen ML gemittelt werden muss, um konsistente Ergebnisse zu erhalten, werden Leitwerte für die drei Kristalle ermittelt, bei denen jeweils über eine, zwei, drei und vier

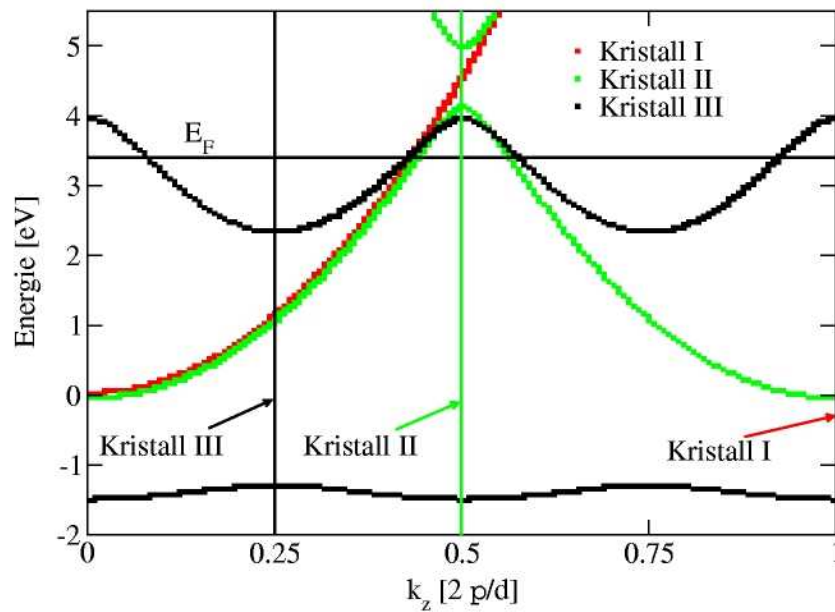


Abbildung C.2: Bandstruktur am $\bar{\Gamma}$ Punkt in $[001]$ Richtung der Modellkristalle mit einer unterschiedlichen Anzahl von nicht-identischen Atomen bzw. Potentialen pro Einheitszelle: Kristall I (rot), Kristall II (grün) und Kristall III (schwarz). Die horizontale Linie stellt die Energie dar, an der der Leitwert bestimmt wird. Die Grenzen der ersten Brillouinzone sind durch senkrechte Linien in den entsprechenden Farben angedeutet. d bezeichnet stets die Gitterkonstante der bcc-artigen Einheitszelle ($d = 5.425$ a.u.).

ML gemittelt wird. In Tabelle C.1 sind die Atome bzw. ML aufgelistet, die bei der Mittelwertbildung benutzt werden. Die Numerierung der Atome bzw. ML bezieht sich auf die Numerierung in Abbildung C.1 rechts. Die Auswahl der ML ist repräsentativ, da andere Kombinationen von ML vergleichbare Ergebnisse liefern.

In Abbildung C.3 sind die berechneten Leitwerte für die drei Modellkristalle I, II und III dargestellt über die Anzahl der für die Mittelwertbildung benutzten ML. Dabei sind die vier Mittelwerte jeweils über verschiedene Atome bzw. ML berechnet (die verwendeten Symbole stehen in der Tabelle C.1). Alle Werte, bei denen die vier verschiedenen Mittelwerte eine Streuung von weniger als $0.01 \times 2e^2/h$ aufweisen, sind mit einem Pfeil markiert.

Die Ergebnisse zeigen, dass bei einer Mittelwertbildung, die nicht die gesamte Einheitszelle (z.B. im III. Kristall bei einer Mittelung über 1, 2 oder 3 ML) oder ein ganzzahliges Vielfaches davon (z.B. im II. Kristall bei einer Mittelung über 3ML) beinhaltet, die Leitwerte sehr von den gewählten ML abhängen. Dabei treten Abweichungen vom korrekten Wert von bis zu $0.3 \times 2e^2/h$ auf. Wird dagegen eine korrekte Mittelung über alle ML der Einheitszelle durchgeführt, so streuen die unterschiedlichen Mittelwerte weniger als $0.01 \times 2e^2/h$. Die absolute Abweichung von $1 \times 2e^2/h$ beträgt zwischen 0.005 für den I. Kristall und 0.02 für den III. Kristall in Einheiten von $2e^2/h$. Dies ist eine für die Leitwertberechnung von Bulk Systemen typische Abweichung. Besonders bei den hier betrachteten

\sum ML	Linke Ebene (Z)	Rechte Ebene (Z')	Symbol
1	1	13	\bigcirc
1	1	14	\times
1	2	13	\triangle
1	2	14	∇
2	1, 2	13, 14	\bigcirc
2	1, 2	15, 16	\times
2	3, 4	13, 14	\triangle
2	3, 4	15, 16	∇
3	1, 2, 3	13, 14, 15	\bigcirc
3	1, 2, 3	14, 15, 16	\times
3	2, 3, 4	13, 14, 15	\triangle
3	2, 3, 4	14, 15, 16	∇
4	1, 2, 3, 4	13, 14, 15, 16	\bigcirc
4	1, 2, 3, 4	11, 12, 13, 14	\times
4	3, 4, 5, 6	11, 12, 13, 14	\triangle
4	3, 4, 5, 6	13, 14, 15, 16	∇

Tabelle C.1: Kombinationen von Atomen bzw. Monolagen (ML), über die jeweils gemittelt wird. Die erste Spalte bestimmt die Anzahl der ML bzw. Atome, über die der Mittelwert gebildet wird, die zweite und dritte Spalte gibt die Atomindizes der linken (Z) und der rechten (Z') Ebene an, durch die der Leitwert bestimmt wird, und die rechte Spalte zeigt das in Abbildung C.3 verwendete Symbol. Andere Kombinationen von ML ergeben vergleichbare Ergebnisse.

nahezu freien Elektronen kann diese Abweichung von der schlechten Raumauffüllung der ASA Potentiale und von dem endlichen $l_{\max} = 4$ stammen. Hier interessiert aber mehr die Streuung der verschiedenen Mittelwerte als die absolute Abweichung von $1 \times 2e^2/h$.

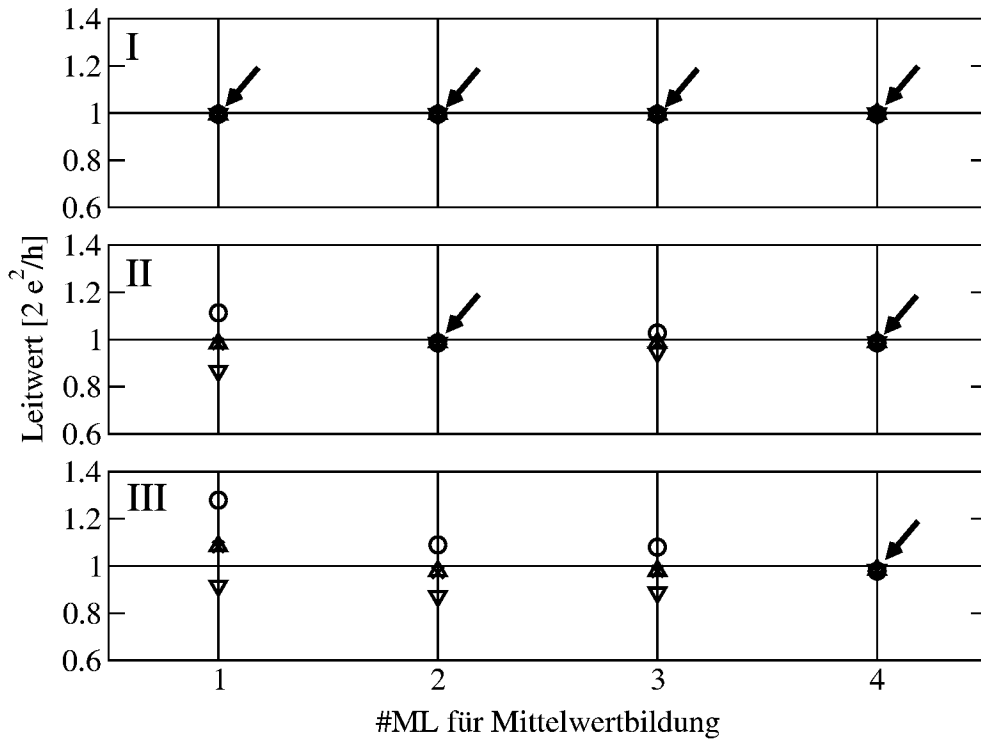


Abbildung C.3: Leitwert am $\bar{\Gamma}$ Punkt der drei Modellkristalle mit 1 (Kristall I, oben), 2 (Kristall II, Mitte) oder 4 (Kristall III, unten) nicht-identischen Monolagen pro Einheitszelle aufgetragen über die Anzahl der Monolagen, über die gemittelt wird. Der Leitwert wird bei einer Energie von 3.4eV bestimmt. Dargestellt sind jeweils die vier verschiedenen Mittelwerte (die Symbole sind in Tabelle C.1 den verschiedenen Kombinationen zugeordnet). Pfeile markieren die Mittelwerte, die eine Streuung von weniger als $0.01 \times 2e^2/h$ aufweisen.

C.2 Bulk ZnSe(001)

In diesem Abschnitt wird ein realer Kristall untersucht: Bulk ZnSe mit einem Stromtransport in [001] Richtung. Die Kristallstruktur wird ausführlicher in Kapitel 6 vorgestellt. Bulk ZnSe besitzt eine Zinkblendestruktur, und die Gitterkonstante beträgt $d = 10.85$ a.u. Somit besteht die Einheitszelle in [001] Richtung aus zwei verschiedenen Monolagen (ML): die erste mit dem Zn Atom und einer Leerstelle und die zweite mit dem Se Atom und der zweiten Leerstelle.

Der Leitwert wird \mathbf{k}_{\parallel} abhängig in der zweidimensionalen Brillouinzone (2DBZ) untersucht. Die Fermienergie liegt knapp oberhalb des Leitungsbandminimums, und der Fermiwellenvektor besitzt eine Länge von etwa $0.2 \times 2\pi/d$. Daher wird nur ein kleiner Ausschnitt aus der 2DBZ um den $\bar{\Gamma}$ Punkt betrachtet. Das Leitungsband in ZnSe ist einfach entartet und somit wird ein Leitwert von $2e^2/h$ erwartet.

In Abbildung C.4 links und in der Mitte ist der \mathbf{k}_{\parallel} aufgelöste Leitwert für alle vier Kombinationen von ML abgebildet. Rechts ist der Mittelwert der vier Kombinationen dargestellt. Man beachte die unterschiedlichen Leitwertskalen. Die nicht gemittelten Leitwerte weichen zum Teil erheblich von dem korrekten Wert ab. Weiter ist sogar der Verlauf in der zweidimensionalen Einheitszelle verschieden. So ist der Trend des Leitwerts bei der Zn-Zn ML gegenläufig zu dem bei der Se-Se ML. Aus Symmetriegründen ist der Leitwert zwischen der Zn-Se und der Se-Zn ML innerhalb der bei der Leitwertberechnung erreichten Genauigkeit gleich.

In Abbildung C.4 rechts ist der gemittelte Leitwert dargestellt. Dieser zeigt innerhalb der Fermikugel einen konstanten Wert von $2e^2/h$ mit einem scharfen Schnitt an der Fermifläche. Daran ist erkennbar, dass ohne eine korrekte Mittelwertbildung nicht nur der Absolutwert des Leitwertes sondern auch der Verlauf in der 2DBZ falsch bestimmt werden kann.

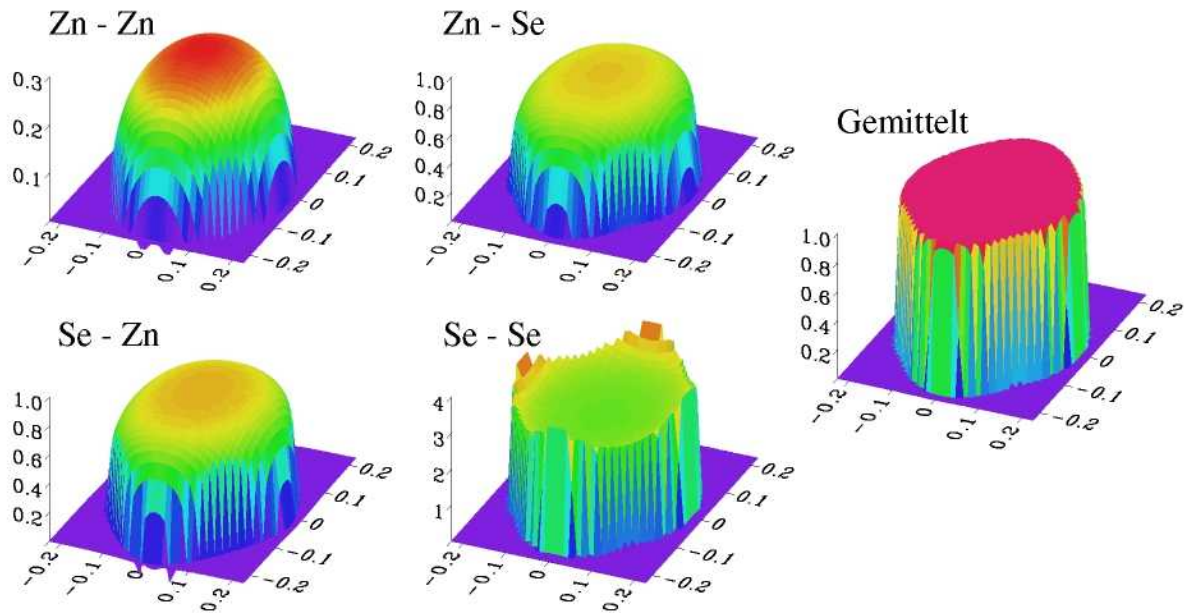


Abbildung C.4: k_{\parallel} aufgelöster Leitwert in Einheiten von $2e^2/h$ für verschiedene Leitwertebenen (links und Mitte). Rechts ist der gemittelte Leitwert dargestellt. Die Fermienergie liegt im Leitungsband. Es ist ein kleiner Ausschnitt aus der zweidimensionalen Brillouinzone in der Nähe des $\bar{\Gamma}$ Punkts abgebildet. Reziproke Vektoren sind in Einheiten von $2\pi/d$ angegeben. Man beachte die unterschiedlichen Leitwertskalen.

Literaturverzeichnis

- [1] International Technology Roadmap for Semiconductors, Roadmap 2000/2001 (<http://public.itrs.net>).
- [2] G. Prinz, *Science* **282**, 1660 (1998).
- [3] S. Wolf, D. Awschalom, R. Buhrman, J. Daughton, S. von Molnár, M. Roukes, A. Chtchelkanova und D. Treger, *Science* **294**, 1488 (2001).
- [4] M. Roukes, *Nature* **411**, 747 (2001).
- [5] P. Ball, *Nature* **404**, 918 (2000).
- [6] A. Barthélémy, A. Fert, J.-P. Contour, M. Bowen, V. Cros, J. de Teresa, A. Hamzic, J. Faini, J. George, J. Grollier, F. Montaigne, F. Pailloux, F. Petroff und C. Vouille, *J. Magn. Magn. Mat.* **242-245**, 68 (2002).
- [7] M. Oestreich, *Nature* **402**, 735 (1999).
- [8] M. Baibich, J. Broto, A. Fert, F. N. V. Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich und J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
- [9] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach und W. Zinn, *Phys. Rev. B* **39**, R4828 (1989).
- [10] S. Parkin, K. Roche, M. Samant, P. Rice, R. Beyers, R. Scheuerlein, E. O'Sullivan, S. Brown, J. Bucchigano, D. Abraham, Y. Lu, M. Rooks, P. Trouilloud, R. Wanner und W. Gallagher, *J. Appl. Phys.* **85**, 5828 (1999).
- [11] S. Datta und B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).
- [12] D. Hägele, M. Oestreich, W. Rühle, N. Nestle und K. Eberl, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1580 (1998).
- [13] J. Kikkawa und D. Awschalom, *Nature* **397**, 139 (1999).
- [14] J. Slonczewski, *J. Magn. Magn. Mat* **159**, L1 (1996).

- [15] A. Hanbicki, R. Magno, S.-F. Cheng, Y. Park, A. Bracker und B. Jonker, Appl. Phys. Lett. **79**, 1190 (2001).
- [16] M. Oestreich, J. Hübner, D. Hägele, M. Bender, N. Gerhardt, M. Hofmann, W. Rühle, H. Kalt, T. Hartmann, P. Klar, W. Heimbrodt und W. Stolz, Adv. in Solid State Phys. **41**, 173 (2001).
- [17] H. Schumacher, C. Chappert, R. Sousa, P. Freitas und J. Miltat, Phys. Rev. Lett. **90**, 017204 (2003).
- [18] T. Gerrits, H. van den Berg, J. Hohlfeld, L. Bär und T. Rasing, Nature **418**, 509 (2002).
- [19] IBM J. Res. Develop. **43**, 243 (1999).
- [20] J. Kudrnovský, V. Drchal, I. Turek, C. Blaas, P. Weinberger und P. Bruno, Phys. Rev. B **62**, 15084 (2000).
- [21] W. Butler, X.-G. Zhang, T. Schulthess und J. MacLaren, Phys. Rev. B **63**, 054416 (2001).
- [22] M. Freyss, N. Papanikolaou, V. Bellini, R. Zeller und P. Dederichs, Phys. Rev. B **66**, 014445 (2002).
- [23] I. Oleinik, E. Tsymbal und D. Pettifor, Phys. Rev. B **62**, 3952 (2000).
- [24] W. Butler, X.-G. Zhang, X. Wang, J. van Ek und J. MacLaren, J. Appl. Phys. **81**, 5518 (1997).
- [25] C. Uiberacker, K. Wang, C. Heide und P. Levy, Appl. Phys. Lett. **89**, 7561 (2001).
- [26] M. Freyss, N. Papanikolaou, V. Bellini, R. Zeller, P. Dederichs und I. Turek, J. Magn. Magn. Mat. **240**, 117 (2002).
- [27] J. MacLaren, X.-G. Zhang, W. Butler und X. Wang, Phys. Rev. B **59**, 5470 (1999).
- [28] J. Mathon und A. Umerski, Phys. Rev. B **63**, R220403 (2001).
- [29] A. Filip, B. Hoving, F. Jedema, B. van Wees, B. Dutta und S. Borghs, Phys. Rev. B **62**, 9996 (2000).
- [30] S. Gardelis, C. Smith, C. Barnes, E. Linfield und D. Ritchie, Phys. Rev. B **60**, 7764 (1999).
- [31] P. Hammar, B. Bennett, M. Yang und M. Johnson, Phys. Rev. Lett. **83**, 203 (1999).
- [32] C.-M. Hu, J. Nitta, A. Jensen, J. Hansen und H. Takayanagi, Phys. Rev. B **63**, 125333 (2001).

- [33] G. Schmidt, D. Ferrand, L. Molenkamp, A. Filips und B. van Wees, Phys. Rev. B **62**, R4790 (2000).
- [34] E. Rashba, Phys. Rev. B **62**, R16267 (2000).
- [35] A. Fert und H. Jaffrès, Phys. Rev. B **64**, 184420 (2001).
- [36] H. Zhu, M. Ramsteiner, H. Kostial, M. Wassermeier, H.-P. Schönherr und H. Ploog, Phys. Rev. Lett. **87**, 16601 (2001).
- [37] A. Hanbicki, O. v. Erve, R. Magno, G. Kioussoglou, C. Li, B. Jonker, G. Itskos, R. Mallory, M. Yasar und A. Petrou, Appl. Phys. Lett. **82**, 4092 (2003).
- [38] H. Baranger und A. Stone, Phys. Rev. B **40**, 8169 (1989).
- [39] P. Löwdin, Rev. Mod. Phys. **32**, 328 (1960).
- [40] R. Jones und O. Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. **61**, 689 (1989).
- [41] P. Hohenberg und W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [42] M. Levy, Proc. Natl. Acad. Sci. **76**, 6062 (1979).
- [43] L. Thomas, Proc. Camb. Phil. Soc. **23**, 542 (1927).
- [44] E. Fermi, Rend. Accad., Lincei **6**, 602 (1927).
- [45] W. Kohn und L. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [46] S. Vosko, L. Wilk und N. Nusair, Can. J. Phys. **58**, 1200 (1980).
- [47] D. Ceperley und B. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).
- [48] J. Perdew und A. Zunger, Phys. Rev. B **23**, 5048 (1981).
- [49] J. Korringa, Physica **13**, 392 (1947).
- [50] W. Kohn und N. Rostoker, Annals of Physics **15**, 63 (1961).
- [51] K. Wildberger, *Tight-Binding-Korringa-Kohn-Rostocker-Methode und Grenzflächen-reflektivität in magnetischen Schichtsystemen* (Dissertation, RWTH-Aachen, 1997).
- [52] I. Mertig, E. Mrosan und P. Zische, *Multiple Scattering Theory of Point Defects in Metals: Electronic Properties* (BSB Teubner Teubner-Texte, Leipzig, 1987).
- [53] K. Wildberger, P. Lang, R. Zeller und P. Dederichs, Phys. Rev. B **52**, 11502 (1995).
- [54] R. Podloucky, R. Zeller und P. Dederichs, Phys. Rev. B **22**, 5777 (1980).

- [55] R. Zeller, P. Dederichs, B. Újfalussy, L. Szunyogh und P. Weinberger, Phys. Rev. B **52**, 8807 (1995).
- [56] P. Lang, *Theory of Interlayer Exchange Coupling: Co-Bilayers in Cu* (Dissertation, RWTH-Aachen, 1996).
- [57] V. Bellini, *Electronic Structure of Low-Dimensional Magnetic Systems* (Dissertation, RWTH-Aachen, 2000).
- [58] I. Turek, V. Drchal, J. Kudrnovský, M. Šob und P. Weinberger, *Electronic Structure of Disordered Alloys, Surfaces, and Interfaces* (Kluwer Academic, Boston, 1997).
- [59] B. Drittler, M. Weinter, R. Zeller und P. Dederichs, Phys. Rev. B **39**, 930 (1989).
- [60] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957).
- [61] Y. Imry und R. Landauer, Rev. Mod. Phys. **71**, S306 (1999).
- [62] R. Landauer, Z. Phys. B. **68**, 217 (1987).
- [63] C. Umbach, S. Washburn, R. Laibowitz und R. Weeb, Phys. Rev. B **30**, 4048 (1984).
- [64] S. Washburn, C. Umbach, R. Laibowitz und R. Webb, Phys. Rev. B **32**, 4789 (1985).
- [65] R. Landauer, Phil. Mag. **21**, 863 (1970).
- [66] E. Economou und C. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. **46**, 618 (1981).
- [67] D. Fisher und P. Lee, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [68] A. Stone und A. Szafer, IBM J. Res. Develop. **32**, 384 (1988).
- [69] L. Glazman, G. Lesovik, D. Khmel'nitskii und R. Shekhter, JEPT Lett. **48**, 238 (1988).
- [70] B. van Wees, H. van Houten, C. Beenakker, J. Williamson, L. Kouwenhoven, D. van der Marel und C. Foxon, Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988).
- [71] D. Wharam, T. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. Frost, D. Hasko, D. Peacock, D. Ritchie und G. Jones, J. Phys. C **21**, L209 (1988).
- [72] S. Frank, P. Poncharal, Z. Wang und W. de Heer, Science **280**, 1744 (1998).
- [73] F. Bloch, Z. Phys. **52**, 555 (1928).
- [74] P. Mavropoulos, N. Papanikolaou und P. Dederichs, arXiv:cond-mat/0306604 (2003).
- [75] M. Abramowitz und I. Stegun (Hrsg.), *Handbook of Mathematical Functions, with Formulas, Graphs and Mathematical Tables* (Dover Pubns, 1974).

- [76] R. Schad, C. Potter, P. Belien, G. Verbanck, V. Moshchalkov und Y. Bruynseraede, Appl. Phys. Lett. **64**, 3500 (1994).
- [77] M. Julliere, Phys. Lett. **54A**, 225 (1975).
- [78] T. Miyazaki und N. Tezuka, J. Magn. Magn. Mater. **139**, L231 (1995).
- [79] J. Moodera, L. Kinder, T. Wong und R. Meservey, Phys. Rev. Lett. **74**, 3273 (1995).
- [80] J. Faure-Vincent, C. Tiusan, E. Jouguelet, F. Canet, M. Sajieddine, C. Bellouard, E. Popova, M. Hehn, F. Montaigne und A. Schuhl, Appl. Phys. Lett. **82**, 4507 (2003).
- [81] M. Bowen, M. Bibes, A. Barthélémy, J.-P. Contour, A. Anane, Y. Lemaître und A. Fert, Appl. Phys. Lett. **82**, 233 (2003).
- [82] J. de Teresa, A. Barthélémy, A. Fert, J. Contour, F. Montaigne und P. Seneor, Science **286**, 507 (1999).
- [83] W. Butler, X.-G. Zhang, T. Schulthess und J. MacLaren, Phys. Rev. B **63**, 092402 (2001).
- [84] J. MacLaren, X.-G. Zhang und W. Butler, Phys. Rev. B **56**, 11827 (1997).
- [85] J. Slonczewski, Phys. Rev. B **39**, 6995 (1989).
- [86] P. Mavropoulos, N. Papanikolaou und P. Dederichs, Phys. Rev. Lett. **85**, 1088 (2000).
- [87] V. Heine, Phys. Rev. **6**, A1689 (1965).
- [88] K. Wang, P. Levy, S. Zhang, L. Szunyogh und P. Weinberger, *Ab initio Calculation of Magnetoresistance of Tunnel Junctions*, (unveröffentlicht).
- [89] U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
- [90] P. Bruno, Phys. Rev. B **52**, 411 (1995).
- [91] K. Wildberger, R. Zeller, P. Dederichs, J. Kudrnovský und P. Weinberger, Phys. Rev. B **58**, 13721 (1998).
- [92] O. Wunnicke, N. Papanikolaou, R. Zeller, P. Dederichs, V. Drchal und J. Kudrnovský, Phys. Rev. B **65**, 064425 (2002).
- [93] J. Henk, Phys. Rev. B **64**, 035412 (2001).
- [94] M. Oestreich, S. Hallstein, A. Heberle, K. Eberl, E. Bauser und W. Rühle, Phys. Rev. B **53**, 7911 (1996).
- [95] J. Nitta, T. Akazaki und H. Takayanagi, Phys. Rev. Lett. **78**, 1335 (1997).

- [96] J. Kikkawa und D. Awschalom, Phys. Rev. Lett. **80**, 4313 (1998).
- [97] S. Alvarado und P. Reaud, Phys. Rev. Lett. **68**, 1387 (1992).
- [98] V. LaBella, D. Bullock, Z. Ding, C. Emery, A. Venkatesan, W. Oliver, G. Salamo, P. Thibado und M. Mortazavi, Science **292**, 1518 (2001).
- [99] R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag und L. Molenkamp, Nature **402**, 787 (1999).
- [100] B. Jonker, Y. Park, B. Bennett, H. Cheong, G. Kioseoglou und A. Petrou, Phys. Rev. B **62**, 8180 (2000).
- [101] Y. Ohno, D. Young, B. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohne und D. Awschalom, Nature **402**, 790 (1999).
- [102] A. Hanbicki, B. Jonker, G. Itskos, G. Kioseoglou und A. Petrou, Appl. Phys. Lett. **80**, 1240 (2002).
- [103] T. Manago und H. Akinaga, Appl. Phys. Lett. **81**, 694 (2002).
- [104] V. Motsnyi, V. Safarov, J. D. Boeck, J. Das, W. van Roy, E. Goovaerts und G. Borghs, Appl. Phys. Lett. **81**, 265 (2002).
- [105] A. Fert, Private Mitteilung.
- [106] R. Fiederling, P. Grabs, W. Ossau, G. Schmidt und L. Molenkamp, Appl. Phys. Lett. **82**, 2160 (2003).
- [107] D. Pierce und F. Meier, Phys. Rev. B **13**, 5484 (1976).
- [108] B. Jonker, A. Hanbicki, Y. Park, G. Itskos, M. Furis, G. Kioseoglou, A. Petrou und X. Wei, Appl. Phys. Lett. **79**, 3098 (2001).
- [109] H. Heberle, W. Rühle und K. Ploog, Phys. Rev. Lett. **72**, 3887 (1994).
- [110] M. Oestreich und W. Rühle, Phys. Rev. Lett. **74**, 2315 (1995).
- [111] M. Ramsteiner, H. Hao, A. Kawaharazuka, H. Zhu, M. Kästner, R. Hey, L. Däweritz, H. Grahn und K. Ploog, Phys. Rev. B **66**, 081304 (2002).
- [112] G. Kirczenow, Phys. Rev. B **63**, 54422 (2001).
- [113] D. Grundler, Phys. Rev. B **63**, R161307 (2001).
- [114] C.-M. Hu und T. Matsuyama, Phys. Rev. Lett. **87**, 066803 (2001).
- [115] T. Schäpers, J. Nitta, H. Heersche und H. Takayanagi, Phys. Rev. B **64**, 125314 (2001).

- [116] O. Wunnicke, P. Mavropoulos, R. Zeller, P. Dederichs und D. Grundler, Phys. Rev. B **65**, R241306 (2002).
- [117] M. Zwierzycki, K. Xia, P. Kelly, G. Bauer und I. Turek, Phys. Rev. B **67**, 092401 (2003).
- [118] P. Mavropoulos, O. Wunnicke und P. Dederichs, Phys. Rev. B **66**, 024416 (2002).
- [119] S.-H. Wei und A. Zunger, Phys. Rev. B **60**, 5404 (1999).
- [120] M. Oshikiri und F. Aryasetiawan, Phys. Rev. B **60**, 10754 (1999).
- [121] H.-P. Schönherr, R. Nötzel, W. Ma und K. Ploog, J. Appl. Phys. **89**, 169 (2001).
- [122] A. Filipe und A. Schuhl, J. Appl. Phys. **81**, 4359 (1997).
- [123] B. Jonker und G. Prinz, J. Appl. Phys. **69**, 2938 (1991).
- [124] J. Callaway und C. Wang, Phys. Rev. B **16**, 2095 (1977).
- [125] C. Wang und B. Klein, Phys. Rev. B **24**, 3393 (1981).
- [126] J. Cornwell, *Group Theory and Electronic Energy Bands in Solids* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1969).
- [127] S. Erwin, S.-H. Lee und M. Scheffler, Phys. Rev. B **65**, 205422 (2002).
- [128] K. Schep, J. van Hoof, P. Kelly, G. Bauer und J. Inglesfield, Phys. Rev. B **56**, 10805 (1997).
- [129] M. Stiles und D. Penn, Phys. Rev. B **61**, 3200 (2000).
- [130] D. Grundler, Private Mitteilung.
- [131] R. Stroud, A. Hanbicki, Y. Park, A. Petukhov, B. Jonker, G. Itskos, G. Kioseoglou, M. Furis und A. Petrou, Phys. Rev. Lett. **89**, 166602 (2002).
- [132] B. Jonker, Private Mitteilung.
- [133] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570 (1957).
- [134] D. Greenwood, Proc. Phys. Soc. London **71**, 585 (1958).
- [135] W. Butler, Phys. Rev. B **31**, 3260 (1995).

Veröffentlichungen

Teile dieser Doktorarbeit wurden vorveröffentlicht in:

O. Wunnicke, N. Papanikolaou, R. Zeller, P.H. Dederichs, V. Drchal und J. Kudrnovský, *Effects of Resonant Interface States on Tunneling Magnetoresistance*, Phys. Rev. B **65**, 064425 (2002).

O. Wunnicke, Ph. Mavropoulos, R. Zeller, P.H. Dederichs und D. Grundler, *Ballistic Spin Injection from Fe(001) into ZnSe and GaAs*, Phys. Rev. B. **65**, 241306(R) (2002).

Ph. Mavropoulos, O. Wunnicke und P.H. Dederichs, *Ballistic Spin Injection and Detection in Fe/Semiconductor/Fe Junctions*, Phys. Rev. B **66**, 024416 (2002).

P.H. Dederichs, Ph. Mavropoulos, O. Wunnicke, N. Papanikolaou, V. Bellini, R. Zeller, V. Drchal und J. Kudrnovský, *Importance of Complex Band Structure and Resonant States for Tunneling*, J. Mag. Mag. Mat. **240**, 108 (2002).

O. Wunnicke, Ph. Mavropoulos und P.H. Dederichs, *Spin Injection in Ballistic Fe/ZnSe and Fe/GaAs(001) Junctions*, Phase Transitions **76**, 511 (2003).

O. Wunnicke, Ph. Mavropoulos und P.H. Dederichs, *Spin Injection: Interface Resistance in Fe/Semiconductor Junctions Calculated from First Principles*, J. of Superconductivity: Incorporating Novel Magnetism **16**, 171 (2003).

Danksagung

An erster Stelle danke ich Herrn Prof. Dr. P.H. Dederichs für die sehr interessante Aufgabenstellung und die vielen hilfreichen Diskussionen. Ich bedanke mich für seine Unterstützung und sein Interesse am Fortgang dieser Arbeit. Außerdem möchte ich ihm für den Freiraum danken, den er mir gewährt hat.

Bei Herrn Prof. Dr. H. Müller-Krumbhaar bedanke ich mich für die Möglichkeit, an seinem Institut promovieren zu können.

Herrn Prof. Dr. G. Güntherodt danke ich für seine Bereitschaft, das Zweitgutachten über diese Arbeit zu erstellen.

Ich möchte mich bei den Herren Dr. Josef Kudrnovský und Dr. Vaclav Drchal aus dem schönen Prag für die sehr gute und hilfreiche Zusammenarbeit bedanken.

Mein Dank gilt Herrn Dr. Dirk Grundler für die gute Zusammenarbeit und den interessanten Diskussionen.

Bei Herrn Prof. Dr. A. Brataas bedanke ich mich für den Hinweis zur Berechnung des Grenzflächenwiderstandes bei der thermischen Spininjektion durch eine Schottkybarriere.

Ich danke Herrn Prof. B.T. Jonker für die Informationen über die Experimente zur Spininjektion vor der Veröffentlichung.

Allen Mitarbeitern des Instituts "Theorie III" möchte ich für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre und den vielen anregenden Diskussionen in der Kaffeepause danken.

Den Mitarbeitern der Jülicher KKR-Arbeitsgruppe danke ich für die sehr gute und angenehme Zusammenarbeit sowie den vielen wissenschaftlichen Diskussionen und Hilfestellungen. Bei den Herren Dr. R. Zeller und Dr. Ph. Mavropoulos bedanke ich mich für das Korrekturlesen von Teilen des Manuskripts.

Mein Dank gilt Frau Luise Snyders für Ihre Hilfsbereitschaft in allen und besonders in organisatorischen Fragen.

Bei Herrn Dr. Valerio Bellini möchte ich mich besonders bedanken für seine Freundschaft, seine geduldige Hilfe bei der Einarbeitung in das KKR Programm sowie die interessanten wissenschaftlichen und besonders nicht-wissenschaftlichen Diskussionen. Weiter danke ich ihm für die schöne und entspannte Zeit zu Beginn der Doktorarbeit sowie für die Pastas.

Ein besonderer Dank gilt Herrn Dipl. Phys. Holger Höhler für seine Freundschaft, seine ständige Hilfsbereitschaft und die vielen sehr hilfreichen Diskussionen. Weiter danke ich ihm für das sorgfältige Korrekturlesen des Manuskripts.

Ein großer Dank gilt allen meinen Freunden, durch die die Zeit während der Doktorarbeit sehr schön wurde.

Bei meinen Geschwistern und meinen Eltern möchte ich mich besonders herzlich bedanken für Ihre Hilfe und Unterstützung zu allen Zeiten, sowie das sorgfältige Korrekturlesen des Manuskripts und für die vielen spontanen Besuche in Aachen.

Jülich, den 28. April 2003

Olaf Wunnicke

Forschungszentrum Jülich
in der Helmholtz-Gemeinschaft



Jül-4085
September 2003
ISSN 0944-2952